



Vers une meilleure compréhension et caractérisation du comportement des aciers à très haute température

Christophe Pradille

► To cite this version:

Christophe Pradille. Vers une meilleure compréhension et caractérisation du comportement des aciers à très haute température. Matériaux. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2011. Français. NNT : 2011ENMP0017 . pastel-00617963

HAL Id: pastel-00617963

<https://pastel.archives-ouvertes.fr/pastel-00617963>

Submitted on 31 Aug 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

École Doctorale n°364 : Sciences Fondamentales et Appliquées

Doctorat ParisTech

T H È S E

pour obtenir le grade de docteur délivré par

l'École nationale supérieure des mines de Paris

Spécialité “sciences et génie des matériaux ”

présentée et soutenue publiquement par

Christophe Pradille

Le 2 Mai 2011

**Vers une meilleure compréhension et caractérisation du
comportement des aciers à très haute température**

Directeur de thèse : **Yvan CHASTEL**

Co-encadrement de la thèse : **Michel BELLET**

Jury

M. Claude AIME, Professeur, Laboratoire H. Fizeau, UNSA

Mme. Véronique FAVIER, Professeur, PIMM, Arts et Métiers ParisTech

M. Jean-José ORTEU, Professeur, Institut Clément Ader, Ecole des Mines d'Albi

Mme. Joëlle DEMURGER, Ingénieur de recherche, Process simulation, ASCOMETAL CREAS

M. Laurent SOULARD, Ingénieur de recherche, DAM, CEA

Président

Rapporteur

Rapporteur

Examineur

Examineur

MINES ParisTech

CEMEF - CNRS UMR 7635

Rue Claude Daunesse - BP 207

06904 Sophia Antipolis cedex - France

Remerciements

C'est une tâche bien délicate que je m'apprête à exécuter. Comment écrire en quelques lignes de remerciements, le plaisir et les bons moments passés durant ces trois ans et quelques mois. Le plus délicat étant de n'oublier aucune des personnes avec qui j'ai travaillé ou que j'ai côtoyé. Alors pour ces personnes, je citerai Gotthold Ephraim Lessing : « On ne fait vraiment l'éloge d'un artiste que lorsqu'on parle assez de son oeuvre pour oublier de louer sa personne ». Le sentiment que l'on ressent en écrivant ces quelques lignes est assez confus. Le bonheur d'avoir travaillé avec des personnes à la fois intéressantes et passionnées se mêle au soulagement de savoir que ces quelques lignes représente l'aboutissement de plus de trois ans de travail.

Mes premiers mots iront donc tout naturellement à Yvan Chastel et Michel Bellet qui ont dirigé mes recherches. Je les remercie pour le soutien, les conseils et surtout pour la liberté d'action qu'ils m'ont laissé. Je leur suis également très reconnaissant de la confiance qu'ils ont pu me témoigner en me laissant explorer des nouveaux domaines et participer de façon active à la conduite du projet. Michel, en plus des quelques mots précédents, je rajouterai un grand merci pour ces relectures minutieuses du manuscrit, pour votre disponibilité et pour les nombreux cafés bus ensemble. Yvan, malgré toutes vos journées surchargées, merci d'avoir toujours trouvé un moment pour discuter quand je frappais à votre porte. Et encore, un grand merci pour cette confiance que vous me témoignez aujourd'hui encore.

Mes remerciements vont aussi à Claude Aime pour l'honneur qu'il m'a fait de présider mon jury. Je remercie également Véronique Favier et Jean José Orteu d'avoir accepté d'être les rapporteurs de cette thèse ainsi que Laurent Soulard d'avoir accepté de juger cette thèse. Mes plus sincères remerciements vont également à Joelle Demurger, d'une part pour avoir accepté de juger cette thèse, mais surtout pour les nombreux échanges que nous avons pu avoir durant ce projet.

Une pensée toute particulière pour Bernard Monasse, mon troisième « encadrant », qui plus qu'un encadrant est une personne avec qui j'ai pu échanger et travailler en parfaite collaboration. Pour tout cela, je tiens à lui témoigner ma gratitude et lui exprimer tout le plaisir que j'ai eu de travailler avec lui.

Je remercie Francois Bay pour sa bonne humeur et ses fous rires, et pour les échanges que nous avons eu lors du stage de Lucie Normand. Ainsi que l'ensemble des chercheurs avec qui j'ai pu travailler ou échanger, Roland Logé, Noelle Billon, Pierre Momitonnet, Marc, P.O, Katia, Alain, Luisa et Hugues.

De nombreuses personnes ont également contribué à l'aboutissement de ce travail, notamment je remercie les personnes du groupe MEAS, Alain, Christelle, Marc, Eric et Francis, mais aussi Marie Françoise, Sylvie, Geneviève, Patrick, Florence et Sylvie. Un

merci plus particulier à Lionel et Simon, le premier pour tout l'aide qu'il a pu m'apporter sur les mesures et le second que je remercie pour son aide très précieuse sur les spectacles.

Un grand merci à Gilbert pour tous les coups de main qu'il a pu me filer et pour sa disponibilité.

Je tiens à remercier par mes autres soutiens, Greg et nos petits cafés matinaux (et ses petits .bat), Emile et nos petits pastis du soir, Larbi (debug) et ses blagues graveleuses (et pour sa présence le grand jour).

Je remercie aussi ma famille pour leur soutien et leur aide, même bien avant cette thèse, et enfin je terminerai par une personne particulière, ma Toutie, qui m'a épaulé ces deux dernières années.

Table des matières

Chapitre 1 : Introduction	- 5 -
Chapitre 2 : Etude bibliographique	- 13 -
1. Les procédés de solidification et la problématique de la fissuration à chaud	- 14 -
1.1 Description de la coulée en lingot	- 14 -
1.2 Description de la coulée continue.....	- 15 -
1.3 Description des différents états et des microstructures de l'acier au cours du procédé	- 16 -
1.4 Les interactions thermiques, métallurgiques et mécaniques.....	- 18 -
2. Etat de l'art sur la fissuration à chaud, pendant le processus de solidification.	- 19 -
2.1 Origines de la fissuration à chaud	- 19 -
2.2 Rôle des éléments chimiques	- 22 -
2.3 Influence du mouillage	- 25 -
2.4 Facteurs métallurgiques:.....	- 26 -
2.5 Les critères de fissuration à chaud.....	- 27 -
3. Analyse des capacités de la simulation numérique pour la prédiction de la fissuration à chaud.	- 30 -
3.1 La simulation numérique des gradients thermiques	- 30 -
3.2 Simulation numérique du comportement mécanique	- 32 -
3.3 Etudes des paramètres influents sur les critères de fissuration à chaud.....	- 35 -
4. Conclusions et discussion	- 44 -
Chapitre 3 : Caractérisation mécaniques par essais de traction à chauffage résistif -	49 -
1. Caractérisation du comportement métallurgique des nuances retenues	- 50 -
1.1 Les nuances d'acier retenues	- 50 -
2. Dispositif expérimental utilisé pour la caractérisation mécanique	- 51 -
2.1 Présentation de la machine Taboo utilisée au CEMEF.....	- 51 -
2.2 Dispositif utilisé chez Ascometal	- 53 -
3. Description de la formulation	- 55 -
3.1 Le problème thermo-électrique	- 55 -
3.2 Conditions aux limites et conditions interfaciales	- 57 -
4. Problème mécanique	- 59 -
5. Résolution numérique du problème couplé.....	- 62 -
5.1 Formulation intégrale du problème électrique thermique	- 62 -
5.2 Formulation intégrale du problème mécanique	- 62 -
5.3 Choix d'un élément.....	- 63 -
5.4 Discrétisation spatiale:	- 63 -

6. Mesures des paramètres nécessaires à la simulation	- 64 -
6.1 Mesure de résistivité électrique	- 65 -
6.2 Résistances électriques de contact :	- 72 -
6.3 Mesure d'émissivité:	- 75 -
7. Validations numériques.....	- 79 -
7.1 Validation de la loi d'Ohm, couplage thermique en mono domaine	- 79 -
7.2 Validation de la loi d'Ohm, couplage thermique en multi domaines	- 81 -
8. Régulation de la température: modélisation de la boucle PID	- 85 -
9. Stratégie de simulation et validations :	- 87 -
9.1 Modélisation de l'essai Taboo.....	- 88 -
9.2 Modélisation de l'essai Gleeble.....	- 97 -
10. Aide au design des éprouvettes :.....	- 101 -
10.1 Vers une géométrie d'éprouvette optimisée	- 101 -
10.2 Vers une géométrie d'éprouvette optimisée pour Taboo.....	- 106 -
11. Conclusion :.....	- 109 -
<i>Chapitre 4 : Mesure de déformation par corrélation d'images de speckles laser- 115</i>	
1. Mesure de champs de déplacement, étude des méthodes existantes	- 116 -
1.1 Les méthodes de moiré et les méthodes de grilles.....	- 116 -
1.2 Les techniques de corrélation : corrélation d'images et méthode de grilles	- 118 -
1.3 L'holographie et l'holographie interférométrique	- 119 -
1.4 Les techniques basées sur les speckles laser	- 120 -
2. Problématique haute température : Choix d'un nouveau moyen de mesure.....	- 123 -
3. Mesure du déplacement	- 126 -
3.1 Principe de la corrélation d'images	- 126 -
3.2 Interpectre de deux signaux, cas bidimensionnel	- 127 -
3.3 Intercorrélation dans le cas unidimensionnel continu	- 129 -
3.4 L'intercorrélation: formulation de Fourier d'un cas bidimensionnel	- 131 -
4. Mise en place d'un nouvel algorithme hybride	- 132 -
4.1 Les limites de l'interspectre : décalage non circulaire dans le calcul de déformation.....	- 132 -
4.2 Avantages et inconvénients de l'interspectre et de l'inter corrélation pour nos applications. -	134
4.3 Vers un nouvel algorithme hybride(CC-CS)	- 135 -
4.4 Validation numérique de l'algorithme.....	- 137 -
4.5 Problème classique en traitement du signal : l'effet du sous-échantillonnage.	- 138 -
5. Dispositif de mesure installé au Cemef	- 140 -
5.1 Description du montage expérimental.....	- 140 -
5.2 Validation de la nouvelle méthode sur des essais à froid	- 142 -
6. Dispositif de mesure développé chez Ascometal	- 147 -
6.1 Description du montage expérimental.....	- 147 -
6.2 Validation	- 151 -
7. Faisabilité d'essais haute température.....	- 153 -
7.1 Changement de l'état de surface du à l'oxydation.....	- 153 -
8. Application aux essais à chaud	- 157 -
8.1 Résultats d'essais Taboo :	- 158 -
8.2 Résultats essais Gleeble :	- 161 -
9. Conclusions.....	165
<i>Chapitre 5 : Analyse inverse et Caractérisation Mécanique</i>	- 171 -
1. Méthodes de minimisation de la fonction coût.....	- 172 -

1.1 Les méthodes d'ordre zéro	- 172 -
1.2 Les méthodes à direction de descente	- 173 -
1.3 Choix d'une méthode d'optimisation	- 174 -
2. Algorithme MOOPI.....	- 174 -
2.1 Présentation de l'algorithme.....	- 174 -
2.2 Choix d'une fonction coût : mesures globales.....	- 175 -
2.3 Choix de la loi de comportement :	- 176 -
2.4 Validation de l'algorithme :	- 176 -
3. Identification de paramètres rhéologiques sur des essais Taboo.....	- 182 -
3.1 Essais de traction à chaud.....	- 182 -
3.2 Résultats :	- 184 -
3.3 Essai de traction à déplacement imposé	- 194 -
3.4 Essai de tractions pour des températures supérieures à 1350°C.....	- 196 -
4. Identification à partir des mesures de champs.....	- 199 -
4.1 Méthodes d'identification à partir de mesures de champs.....	- 200 -
4.2 Exploitation des mesures de champs	- 203 -
4.3 Vers l'identification d'une mesure de champs par une méthode de recalage EF	- 207 -
5. Conclusion	- 210 -
<i>Bibliographie.....</i>	<i>213</i>
<i>Chapitre 6 : Apport micro de la dynamique moléculaire</i>	<i>217</i>
1. La dynamique moléculaire « classique »	- 218 -
1.1 Principes.....	- 218 -
1.2 Les grandeurs thermodynamiques.....	- 220 -
2. Les limites de la dynamique moléculaire.....	- 221 -
3. Les potentiels utilisés dans la bibliographie pour décrire le comportement du fer - 221	
3.1 Les potentiels de paires	- 221 -
3.2 Les potentiels à trois corps	- 223 -
3.3 Les potentiels à N corps	- 223 -
3.4 Discussion :	- 226 -
4. L'application d'un potentiel à N corps au Fer CFC.....	- 227 -
4.1 Validation du potentiel et du jeu de paramètres	- 227 -
4.2 Caractéristiques à l'état liquide	- 238 -
4.3 Propriétés de la zone semi solide.....	- 249 -
5. Etude du comportement mécanique de mono cristaux de fer	- 257 -
5.1 Propriétés statiques.....	- 258 -
5.2 Module d'élasticité	- 259 -
5.3 Tenseur d'élasticité	- 261 -
6. Conclusion	- 263 -
<i>Chapitre 7 : Conclusions et discussion.....</i>	<i>- 272 -</i>

Chapitre 1 : Introduction

Ce travail s'inscrit dans le cadre du projet "Crackacks" (Concerted Research for Analysis of CRACK phenomena during Solidification of Steel) qui a été financé par l'ANR et regroupe des groupes industriels de la sidérurgie (ArcelorMittal, Ascometal, Industeel), des partenaires académiques (Arts et Métiers Paris-Tech, CEMEF), ainsi que Transvalor et le CTIF. Ce projet lancé en février 2008 vise à mieux comprendre les phénomènes de rupture à chaud qui affectent certains aciers coulés en lingot ou en continu. D'un point de vue industriel, la compréhension de la fissuration à chaud est un défi majeur. A titre d'exemple, pour une société comme Industeel qui produit chaque année 442 kT d'acier dont 191kT en lingot, une moyenne de 10% de ces lingots présente une surface avec fissures, ce qui représente des sommes engagées non négligeables. Ces fissures doivent être supprimées par scarfing (enlèvement de matière au chalumeau), usinage ou surfaçage, ou dans le pire des cas, le lingot doit être refondu. La compréhension et la diminution de la fissuration représenteraient une vraie avancée industrielle car elle permettrait de réduire les temps de production, d'optimiser les procédures et de réduire les rebuts. Ceci est d'autant plus important que le contexte macro économique actuel reste tendu sur le marché des matières premières. En effet, la demande reste croissante dans les pays à forte croissance économique (l'Inde, la Chine ou le Brésil), nécessitant une augmentation de l'offre mondiale. Pour les industriels de la sidérurgie cette augmentation de l'offre doit se faire non pas par de nouveaux moyens de production mais plutôt en augmentant la productivité des moyens actuels.

D'un point de vue scientifique, nous sommes également confrontés à un vrai défi, car les mécanismes de fissuration à chaud sont loin d'être connus et maîtrisés. Les raisons de cette méconnaissance sont surtout dues au fait que l'apparition de fissures se situe à la croisée de plusieurs domaines scientifiques : la thermique, la mécanique, la chimie. Pour mieux comprendre les enjeux de ce projet, revenons sur l'origine de la fissuration ainsi que sur les paramètres influents.

D'un point de vue thermodynamique, la solidification est une transformation d'une phase liquide en une phase solide. Ce changement d'état se fait progressivement avec des évolutions dans une zone pâteuse constituée de solide et de liquide. Le mécanisme de solidification au sein de cette zone pâteuse a été décrit par Dalhe et Amberg [Dalhe96]. En fait, le résultat le plus important d'une analyse consiste à identifier le lieu où apparaissent les fissures dans la zone dendritique.

Un autre paramètre influent pour la fissuration est la composition chimique des alliages. Des éléments d'alliage comme le soufre ou le phosphore, qui ont tendance à diminuer la température de fin de solidification, contribuent à l'apparition de fissures.

Le point de départ du projet Cracracks repose sur les travaux menés par Olivier Cerri lors de sa thèse [Cerri07, Cerri08, Bellet09]. Ce travail a permis de déterminer des critères macroscopiques de fissuration ; ces critères ont ensuite été implémentés dans le logiciel Thercast.

Notre connaissance de départ se révèle donc assez précise en terme de critères de fissuration à chaud. Néanmoins, certains points de blocage subsistent, au premier rang desquels le rôle effectif du couplage fluide/structure lors de la solidification afin de prédire un état thermomécanique pertinent pendant le remplissage des lingots ou dans les fines peaux solides en coulée continue.

Un autre point de blocage reste la bonne connaissance rhéologique des aciers dans les gammes thermomécaniques des procédés. En fait, pour avoir une bonne prédiction en matière de fissuration, avant même les critères de fissuration, il est important de mieux connaître la rhéologie des aciers. Il faut tout d'abord identifier le comportement dans la zone solide pour des hautes températures, jusqu'à des températures proches du solidus (un domaine assez pauvre en données) via des essais de traction simple ou des essais complexes. En effet la littérature s'avère être très pauvre pour des températures supérieures à 1200°C, quant aux données pour des températures comprises entre 900°C et 1200°C, mêmes si elles sont plus nombreuses, puisqu'il s'agit des domaines de températures de forgeage ou de laminage à chaud, ces données permettent de caractériser les grandes déformations (lois purement viscoplastiques). Or ce qui nous intéresse en solidification, ce sont les petites déformations, d'où l'intérêt pour des lois élasto-viscoplastiques caractérisées dans les premiers 5% de déformation.

Les connaissances rhéologiques sont également importantes dans la zone pâteuse puisque, comme cela a été mentionné, la fissuration à chaud s'amorce dans la zone pâteuse Ceci représente une difficulté encore plus grande en terme expérimental, mais ces données sont nécessaires pour comprendre les sollicitations que subit la partie centrale des brames lors de la coulée continue.

Des avancées doivent aussi être accomplies dans l'analyse du comportement mécanique et sa modélisation, via les couplages micro-macro par exemple. Ce travail incombant à un post doctorant devrait permettre de préciser à l'échelle mésoscopique les critères de fissuration macroscopique. Pour cela, il faut faire la liaison avec les approches de type matériau digital : logiciel DigiMicro [Bernacki07].

Les essais thermomécaniques à haute température dans l'état solide et semi solide ont été réalisés en partie au CEMEF sur la machine de traction Taboo, l'autre partie des essais étant réalisée chez Ascometal-Creas sur une Gleeble™[Gleeble]3800. Ces machines d'essai permettent de réaliser des essais de traction pour des températures élevées ; le chauffage est réalisé par effet Joule, c'est-à-dire que l'on utilise la résistance interne des aciers pour les chauffer en leur injectant un courant électrique de forte intensité. Cette méthode de chauffage offre des avantages comme la rapidité de chauffage (100°C/s) ou encore le peu d'encombrement (à la différence de l'induction qui nécessite la présence d'un solénoïde autour des échantillons) mais présente l'inconvénient de produire de forts gradients thermiques. Afin de limiter ou de prendre en compte l'existence de ce gradient thermique,

nous nous sommes appuyés sur un modèle numérique multiphysique résolvant les équations de Maxwell et permettant un couplage électrique/thermique. Ce modèle développé par Yann Favennec [Favennec03] et Larbi Arbaoui [Arbaoui07] vise au final à réaliser une simulation complète des essais Taboo et Gleeble. Cette simulation permet d'une part de déterminer la géométrie optimale des éprouvettes et d'autre part, couplé à un logiciel d'analyse inverse, de déterminer les paramètres des lois de comportement. Des essais rhéologiques dans cette gamme de température présentent aussi un autre défi. En fait, l'ensemble des moyens de mesure de déplacement ne sont pas opérationnels dans ces intervalles de température. Il faut donc trouver des moyens de mesure sans contact. C'est pour cela que nous avons lancé avec le département Hippolyte Fizeau de l'Université de Nice Sophia Antipolis un projet basé sur l'utilisation de speckles pour la mesure de déformations dans des conditions que l'on peut qualifier d'« extrêmes ».

En plus de ces deux grands axes, il a été décidé d'inclure au projet une partie « nano-micro » basée sur l'utilisation de la dynamique moléculaire. Il a été imaginé, en effet, que la dynamique moléculaire permet en effet, permettre l'identification de valeurs pour des paramètres physiques, et donc la compréhension de l'apparition ou non de fissures dans les zones interdendritiques. En fait, il s'agit de mieux comprendre l'influence de l'épaisseur du film interdendritique, ou de la tension de surface dans l'apparition de fissures. On espère également pouvoir étudier avec cet outil le rôle que peuvent jouer des éléments spécifiques comme le phosphore ou le soufre dans la fissuration, ou bien encore calculer des variables difficiles à caractériser, tels le module d'Young, le coefficient de Poisson, la viscosité....

Guide de lecture

Ce travail se divise, en plus d'un premier chapitre qu'on pourrait décrire comme introductif, en cinq grands chapitres, dont le contenu a déjà été partiellement abordé dans l'introduction :

Chapitre 2 : Un des défauts majeur apparaissant lors de la solidification est la fissuration à chaud, comme nous l'avons vu celle-ci représente un défi industriel et scientifique. Dans ce chapitre après une brève présentation des techniques de fonderie, nous verrons quels sont les phénomènes entrant en jeu lors des procédés de solidification, et nous nous intéresserons plus particulièrement à ceux qui jouent un rôle influent sur la fissuration. Pour diminuer les risques de fissuration, les sidérurgistes ont adapté les conditions de solidification en se basant sur des outils numériques dans lesquels des critères de fissuration ont été implémentés. Nous verrons à la lumière de ces critères quels sont les paramètres influant sur la qualité de la prédiction. Ainsi après avoir étudié l'ensemble des phénomènes entrant en jeu ainsi que leur influence, nous pourrons discuter sur les études nécessaires pour améliorer notre compréhension de la fissuration à chaud.

Chapitre 3 : La détermination de l'état de contrainte et de déformation engendré par le refroidissement et la solidification d'une pièce de fonderie nécessite de connaître le comportement mécanique du matériau pour des températures comprises entre 900°C et la température de fusion. Pour ces hautes températures il est nécessaire de prendre en compte les phénomènes liés à la viscosité du matériau et d'utiliser des lois de comportement élasto viscoplastiques. Au cours des différents paragraphes, nous présenterons succinctement les caractéristiques métallurgiques du matériau, le dispositif expérimental développé au CEMEF, ainsi que celui utilisé par Ascometal. Cette dernière étude nous permettra de montrer les limites des moyens conventionnels (extensomètre mécanique) pour la caractérisation mécanique à des températures supérieures à 1100°C.

Comme nous l'avons vu précédemment, l'utilisation d'une machine de traction avec chauffage par effet Joule (Gleeble ou Taboo) induit des gradients thermiques assez importants le long des éprouvettes. Donc une bonne analyse de ces essais, passe nécessairement par une bonne connaissance des conditions thermiques. Il existe deux méthodes pour connaître un champ thermique, la première, expérimentale, en utilisant des thermocouples ou une caméra thermique, mais comme nous le verrons dans ce chapitre cette méthode présente certaines difficultés du fait de l'évolution des propriétés radiatives en fonction de la température et de l'état de surface. L'autre méthode est numérique, elle présente l'avantage de pouvoir s'inscrire facilement dans une boucle d'optimisation.

Chapitre 4 : Le problème des gradients thermiques évoqué dans le paragraphe précédent se pose aussi lorsqu'il s'agit de réaliser des essais de traction. En effet on doit se poser la question : est ce qu'une mesure globale est suffisante pour comprendre le champ de déplacement sur une éprouvette ? La réponse semble être non, alors dans ce cas il est nécessaire d'avoir une mesure locale du déplacement, mais une autre question se pose alors comment mesurer des déplacements à très haute température et pour de faibles déformations ? Dans ce chapitre, nous présenterons une méthode de mesure du

déplacement par speckles laser. Cette technique a été mise en place au Cemef sur la machine Taboo ainsi qu'au sein du groupe Ascométal sur une machine Gleeble™. La technique a été déclinée en deux variantes qui sont légèrement différentes sur le concept et le montage, mais ne diffèrent nullement par leur philosophie. En fait dans les deux cas, la mesure de déplacement se base sur une figure interférométrique produite par la rugosité des éprouvettes.

Chapitre 5 : Nous nous proposons dans ce chapitre de faire une étude bibliographique des méthodes numériques applicables à l'identification de paramètres par analyse inverse. Le but de l'analyse inverse est de déterminer des paramètres difficilement observables à partir de données facilement mesurables. Les méthodes inverses peuvent être divisées en deux grandes classes, l'estimation d'une fonction ou l'identification de paramètres. L'ensemble des problèmes inverses se base sur des données expérimentales. On se trouve donc souvent confronté à des problèmes mal posés ou à des corrélations trop importantes entre les paramètres. Le problème inverse est souvent exprimé sous la forme d'un problème d'optimisation (au sens des moindres carrés), durant lequel on cherche à minimiser une fonction coût ou fonction objectif. Différentes méthodes existent pour la minimisation de la fonction coût. Parmi ces méthodes on distingue deux grandes classes, les méthodes d'ordre zéro et les méthodes à direction de descente (type gradient). Nous avons, dans le cadre de la thèse de Emile Roux [Roux10] contribué au développement d'un module d'analyse inverse. Ce module nous a permis de déduire des lois de comportement pour nos nuances d'acier.

Chapitre 6 : Pour comprendre plus finement les phénomènes de fissuration à chaud des aciers et plus particulièrement comprendre l'origine des fissures en zone interdendritique, ou bien encore comprendre l'action d'éléments d'alliage, nous nous sommes intéressés aux techniques de simulation par dynamique moléculaire. Ces techniques offrent l'avantage de modéliser explicitement les interactions atomiques. Pour simuler de façon réaliste un solide, il faut disposer d'un modèle d'interaction entre atomes. Nous discuterons des modèles existants pour le fer puis nous présenterons le potentiel utilisé. Dans ce chapitre nous présenterons et expliquerons d'une part des phénomènes sur des systèmes solides et semi solides, et d'autre part nous présenterons aussi des premiers résultats mécaniques sur du fer solide.

Bibliographie

- [Arbaoui07] : L. Arbaoui, (2007).Modélisation numérique du procédé de soudage USW, Rapport mastère spécialisée, *Mines ParisTech, CEMEF*.
- [Bellet09] M. Bellet, O. Cerri, M. Bobadilla, Y. Chastel, (2009) Modeling of hot tearing during solidification of steels: assessment and improvement of macroscopic criteria through the analysis of two hot tearing tests, *Metallurgical and Materials Transactions A*, **40**, 2705-2717
- [Bernacki07] : M. Bernacki, H. Dignonnet, H. Resk, T. Coupez, R. Loge, (2007), Development of numerical tools for the multiscale modelling of recrystallization in metals, based on a digital material framework , *NUMIFORM '07: Materials Processing and Design: Modeling, Simulation and Applications, Pts I and II; AIP CONFERENCE PROCEEDINGS*, **908**, pp.375.
- [Cerri07] : O. Cerri, (2007), Rupture à chaud dans les aciers au cours de leur solidification. Caractérisation expérimentale et modélisation thermomécanique, thèse de doctorat, *Mines ParisTech, CEMEF*.
- [Cerri08] O. Cerri, Y. Chastel, M. Bellet, (2008) Hot tearing in steels during solidification – Experimental characterization and thermomechanical modeling, *ASME Journal of Engineering Materials and Technology*, **130**, 1-7
- [Dahle96] : A.K. Dahle, L. Arnberg, (1996), Overview : the rheological properties of solidifyingaluminium foundry alloys , *JOM*, **48**, pp.34.

[Favennec03] : Y. Favennec, V. Labbé, F. Bay, (2003), Induction heating processes optimization a general optimal control approach , *Journal of computational physics*, **187**, pp.68.

[Gleeble] Dynamic Systems Inc. PO Box 1234 Poestenkill, NY12140, info@gleeble.com

[Roux10] E. Roux, (2011), thèse en cours à Mines Paris-Tech-Cemef

Chapitre 2 : Etude bibliographique

Un des défauts majeurs apparaissant lors de la solidification est la fissuration à chaud. Comme nous l'avons vu, celle-ci représente un défi industriel et scientifique. Dans ce chapitre, après une brève présentation des techniques de fonderie, nous verrons quels sont les phénomènes entrant en jeu lors de ces procédés, et nous nous intéresserons plus particulièrement à ceux qui jouent un rôle influent sur la fissuration.

Pour diminuer les risques de fissuration, les sidérurgistes et fondeurs ont adapté les conditions de solidification en se basant sur des outils numériques dans lesquels des critères de fissuration ont été implémentés. Nous verrons à la lumière de ces critères quels sont les paramètres influant sur la qualité de la prédiction.

Ainsi, après avoir étudié l'ensemble des phénomènes entrant en jeu ainsi que leur influence respective, nous pourrions préciser quelles sont les études nécessaires pour améliorer notre compréhension de la fissuration à chaud.

1. Les procédés de solidification et la problématique de la fissuration à chaud

Dans l'industrie de l'acier, on distingue deux grandes voies pour la production des aciers. Une voie que l'on pourrait qualifier de traditionnelle, la voie lingot et une autre, plus récente puisque datant du milieu du XIX^e siècle et utilisée pour les aciers à la fin du XX^e, la coulée continue. En effet les hautes températures de fusion et les mauvaises propriétés thermiques des matériaux ferreux sont la cause de ce développement tardif.



Figure 1 : les deux grandes voies de production des aciers

Cette partie est l'occasion de présenter brièvement ces deux classes de procédés, de voir quels sont les phénomènes qui entrent en jeu.

1.1 Description de la coulée en lingot

La coulée en lingots est la technique traditionnelle. L'acier est coulé puis solidifié dans des lingotières qui sont en fait des moules classiquement réalisés en fonte. Le poids des lingots peut varier de quelques centaines de kilos à plus de 100 tonnes dans le cas de grosses pièces de forge.

Lorsque les lingots d'aciers sont démoulés, ils sont généralement réchauffés à 1200°C pour être écrasés dans un laminier et transformés en demi-produits. Ce procédé nécessitant plusieurs manipulations est de moins en moins utilisé et laisse la place à la coulée continue. Mais la voie lingot reste utilisée pour les fabrications spéciales : petites séries, pièces de grandes tailles servant par exemple pour les composants de réacteur nucléaire ou encore pour des aciers spéciaux.

1.2 Description de la coulée continue

La coulée continue dont un exemple est donné par la Figure 2 a supplanté dans le dernier quart du XX^e siècle la coulée en lingot, cette dernière étant plus onéreuse.

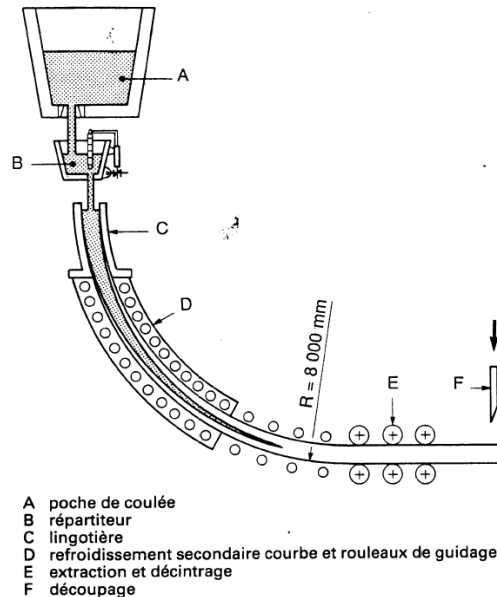


Figure 2 : représentation schématique d'une installation de coulée continue [Heinrich 03]

Le but de la coulée continue est de former et produire de l'acier de manière continue en utilisant une lingotière ouverte aux deux extrémités. N'ayant pas de moule pour retenir le métal liquide, un tel procédé nécessite la formation d'une carapace solide assez résistante pour accueillir à l'intérieur du métal liquide. Voyons maintenant comment est fabriqué de l'acier à l'aide d'une coulée continue.

Elle se compose de deux parties principales : une lingotière, servant à maintenir le métal liquide durant les premiers instants de la coulée, et un puits sans fond délimité par des rouleaux de soutien. Ces rouleaux n'ont d'autre utilité que de maintenir la brique en exerçant une pression sur la croûte solide. Quelques rouleaux sont motorisés et servent à faire avancer la brique.

Au dessus de la lingotière, on peut remarquer un répartiteur servant à alimenter en acier liquide la lingotière de façon continue.

On distingue deux zones de refroidissement, une zone de refroidissement primaire au niveau de la lingotière servant à créer la carapace solide et une zone de refroidissement secondaire créée par des busettes d'eau placées entre les rouleaux. Après solidification, en fin de zone de refroidissement secondaire les brames sont découpées.

1.3 Description des différents états et des microstructures de l'acier au cours du procédé

Durant un processus de solidification, du fait du refroidissement, on peut distinguer trois zones dont les propriétés thermophysiques diffèrent : une zone solide, une zone pâteuse et à l'interface des deux, une zone pâteuse.

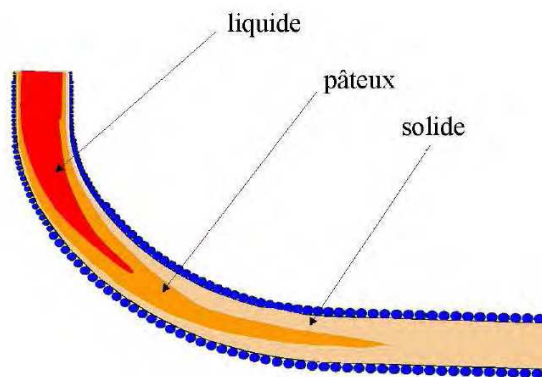


Figure 3 : représentation schématique de la distribution spatiale des trois zones à l'intérieur de la coulée continue ou à l'intérieur d'un lingot [Heinrich 03].

Après solidification, on peut distinguer trois zones en termes de microstructures cristallines, qui selon les nuances d'acier peuvent être plus ou moins développées. La Figure 4 permet de montrer l'anisotropie sur une coupe de lingot, avec des textures de grains différentes, issues de la solidification.

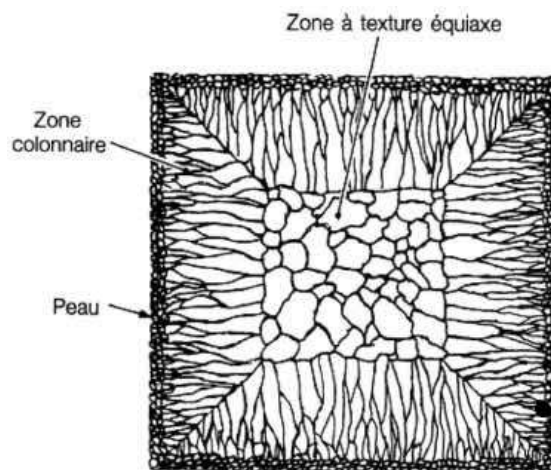


Figure 4 : représentation schématique d'une coupe de lingot

- **zone de peau** : il s'agit d'une zone dont la très faible épaisseur est due à la rapidité de refroidissement, lorsque le métal en fusion entre en contact avec

les parois relativement froides de la lingotière. Pour ces mêmes raisons, cette zone est constituée d'un grand nombre de cristaux de petite taille.

- **zone colonnaire** : Dans cette zone, l'orientation des axes dendritiques se fait dans le sens du gradient thermique. En fait, dès la solidification de la zone de peau, le gradient thermique qui s'établit est perpendiculaire aux parois de la lingotière. Au front de solidification, les conditions sont favorables à la formation de dendrites, seules celles orientées suivant le gradient thermique pourront croître. Et celles-ci "étoufferont" celles qui essaient de se développer et qui ont une orientation moins favorable à leur croissance. C'est pour ces raisons que cette zone présente une structure colonnaire.
- **zone équiaxe** : la texture équiaxe remplace tantôt brutalement tantôt progressivement la texture colonnaire vers le centre des produits. En fait c'est la présence de fines particules qui sont capables de provoquer soit la germination hétérogène soit la croissance des cristaux.

Le diagramme binaire fer-carbone indique que l'acier peut cristalliser sous différentes formes, ferritiques ou austénitiques, ce qui peut avoir des conséquences au niveau de la formation de défauts. En effet, ces deux formes solides ne possèdent pas la même maille cristalline, la ferrite a une maille cubique centrée alors que l'austénite est cubique face centrée. Les deux mailles n'ayant pas la même compacité, leur influence sur le milieu environnant ne sera pas le même.

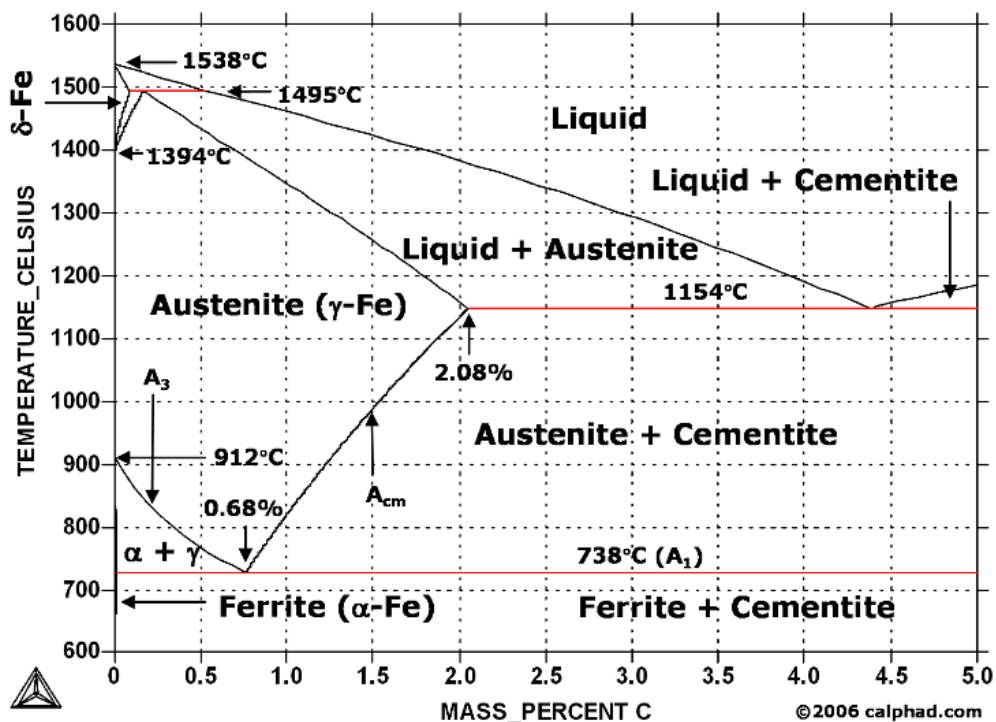


Figure 5 : diagramme fer-carbone (calphad.com)

1.4 Les interactions thermiques, métallurgiques et mécaniques

Les conséquences de la solidification telles que la fissuration à chaud mettent en évidence l'existence d'un fort couplage entre la thermique, la métallurgie et la mécanique. Or, pour bien les comprendre, on ne peut se limiter à étudier ces composantes séparément et il est nécessaire de prendre en compte leurs fortes interactions.

Le schéma ci-dessous présente quelles sont ces interactions.

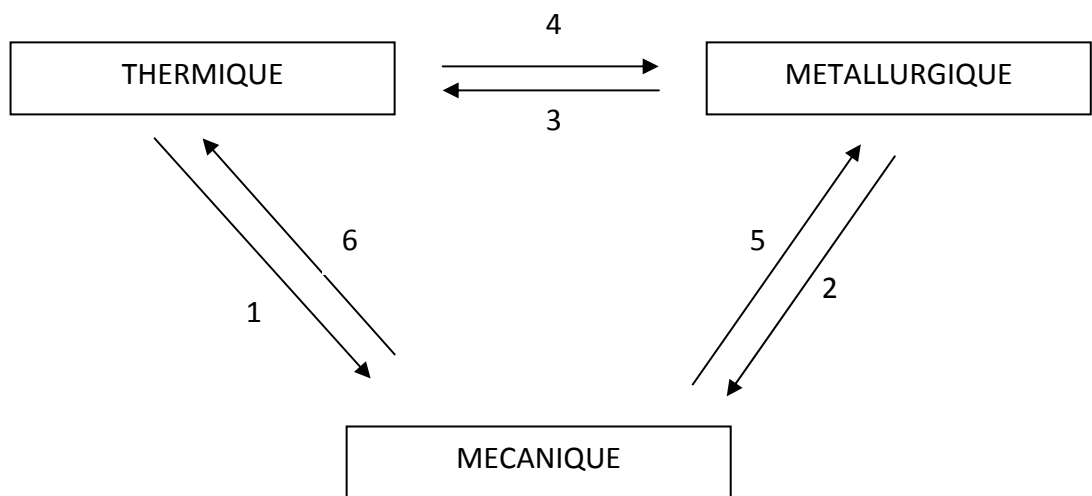


Figure 6 : représentation schématique des interactions croisées lors d'un procédé de solidification

- 1- D'une part, durant la période de solidification, avant que la température à l'intérieur de la pièce de fonderie ne soit totalement homogène, il existe des sollicitations thermiques. C'est-à-dire que du fait des dilatations différentielles qui sont produites par les gradients thermiques, les zones qui se refroidissent plus vite vont agir mécaniquement sur les zones les plus chaudes.

D'autre part, la température influence directement les paramètres rhéologiques du matériau.

- 2- Les changements de phases métallurgiques (passage fer delta – fer gamma – fer alpha et apparitions de divers composés tels que perlite, bainites...). s'accompagnent de changements de compacité de la maille cristalline qui localement, ces sollicitations étant anisotropes, vont entraîner des mises en traction ou en compression de certaines zones.

Les transformations de phases entraînent également des changements de propriétés mécaniques.

- 3- Le changement de métallurgie va aussi directement influencer sur la thermique, notamment du fait des chaleurs latentes de changement de phase.
- 4- Et inversement les changements de température provoquent les changements de phase.
- 5- Les transformations ayant lieu sous contrainte (par exemple du fait du gradient thermique) vont entraîner une déformation plastique appelée plasticité de transformation
- 6- Dans nos applications, la déformation est faible donc la chaleur induite est faible aussi.

2. Etat de l'art sur la fissuration à chaud, pendant le processus de solidification.

2.1 Origines de la fissuration à chaud

De nombreux paramètres relatifs au matériau ont une influence sur la fissuration à chaud, les plus importants étant les suivants :

- La composition chimique du matériau et son mode de solidification (cinétique, phases produites, ségrégations chimiques), ces deux mécanismes étant liés,
- Les caractéristiques de mouillage de la phase liquide interdendritique à bas point de fusion en contact avec un matériau déjà solidifié,
- La viscosité de la phase liquide. Cette dernière est particulièrement importante pour les aspects d'alimentation en liquide de fissures en cours d'ouverture,
- La dilatation thermique des composants du matériau.

Plus précisément, dans le cas de la fissuration de solidification les deux facteurs ayant le plus d'influence sont :

- La composition chimique du matériau et notamment la teneur en éléments résiduels et en impuretés qui contribuent à la formation d'un eutectique à bas point de fusion
- Le mode de solidification du matériau, soit la quantité de la phase liquide interdendritique ou intergranulaire à bas point de fusion, pour les fissures amorcées par décohésion de films liquides résiduels. Lors de la solidification en mode dendritique, apparaît une morphologie très dentelée du front de solidification. La forme de la dendrite suggère une répartition spatiale différente du soluté pendant la

solidification. En effet, le découpage du front de solidification permet de piéger les poches de liquide présentes au sein du solide lors du rapprochement des dendrites. Dans ce cas, le liquide piégé du fait d'une composition différente peut avoir un point de solidus en deçà du solidus macroscopique. Dans ce cas, le liquide piégé dans la matrice solide se trouve sollicité lorsque les contraintes thermomécaniques s'appliquent. La présence de ces poches liquides diminue fortement la résistance globale du matériau et peut donc amener une pièce de fonderie à se fissurer [Borland60]

Du point de vue thermomécanique, la solidification est un passage d'un état liquide à un état solide. L'état métallurgique du matériau est directement impacté par les transferts et gradients thermiques induits par la solidification. Même si l'on parle d'un changement liquide – solide, il n'en demeure pas moins que d'un point de vue métallurgique ce dernier est gradué. En effet entre la zone solide et la zone liquide, il existe une zone intermédiaire appelée zone pâteuse. A l'intérieur de cette zone cohabitent liquide et solide. Pour définir l'intervalle de température sur lequel est observé la zone pâteuse on définit un intervalle de solidification. L'étude de Dalhe et Arnberg [Dalhe96] permet de comprendre le passage du liquide au solide.

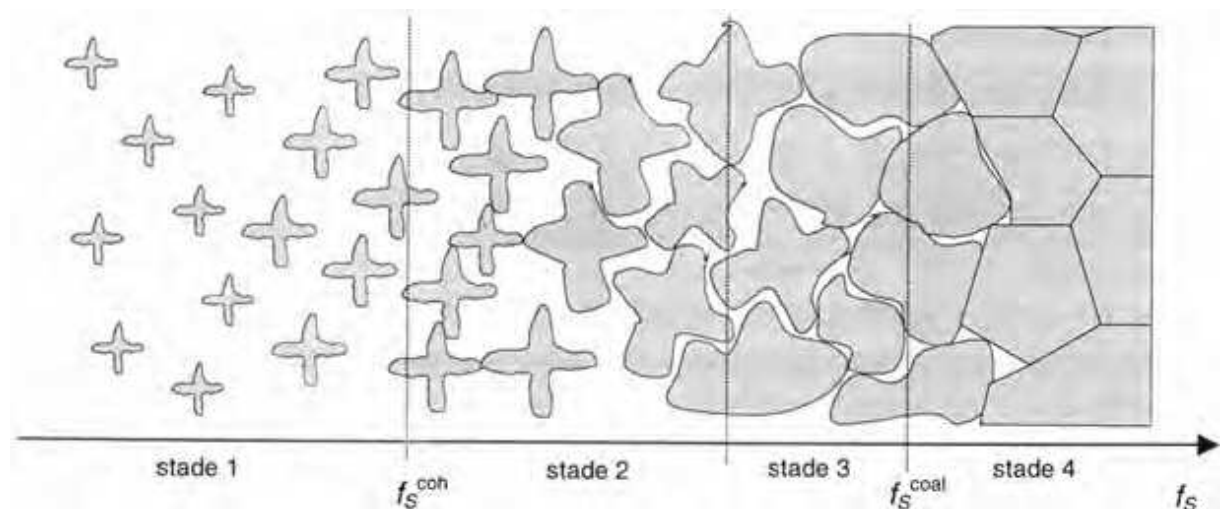


Figure 7 : différents stades de solidification d'un alliage mécanique, stade 1 : suspension, stade 2 : formation d'un réseau solide, stade 3 : apparition de film liquide et stade 4 : coalescence des grains solides [Dalhe96].

Selon cette description, on distingue 4 stades qui permettent la transition d'un état liquide à gauche à un état solide à droite.

Un premier stade issu de la germination où les dendrites flottent librement dans le liquide. Dans cette zone le mélange liquide solide se comporte comme une suspension. Lorsque les dendrites croissent, elles atteignent très vite un seuil de percolation. A partir de cette fraction solide cohérente, on observe un réseau solide interconnecté. Mais le liquide circule librement et aisément dans ce réseau. Par la suite, plus la taille des dendrites augmente, plus le réseau devient dense et seuls quelques films liquides

subsistent. La perméabilité du réseau poreux chute drastiquement, on atteint le stade 3. Au stade 4, la fraction solide de coalescence est atteinte, c'est-à-dire que des ponts solides se forment entre les grains solides, ce qui isole totalement les films liquides dans des poches. Si on peut estimer que la fraction solide de coalescence se situe autour de 0.97, la fraction solide de cohérence reste plus difficile à déterminer. Sa valeur peut osciller entre 0.15 et 0.6 selon les aciers et les alliages [Eskin04].

C'est dans ce stade 4, qu'il a été montré d'un point vu phénoménologique que durant cette période de la solidification l'acier va connaître une période de fragilité appelée BTR (**Brittle Temperature Range**). Le BTR est un intervalle de fragilité qui représente un intervalle entre des fractions solides.

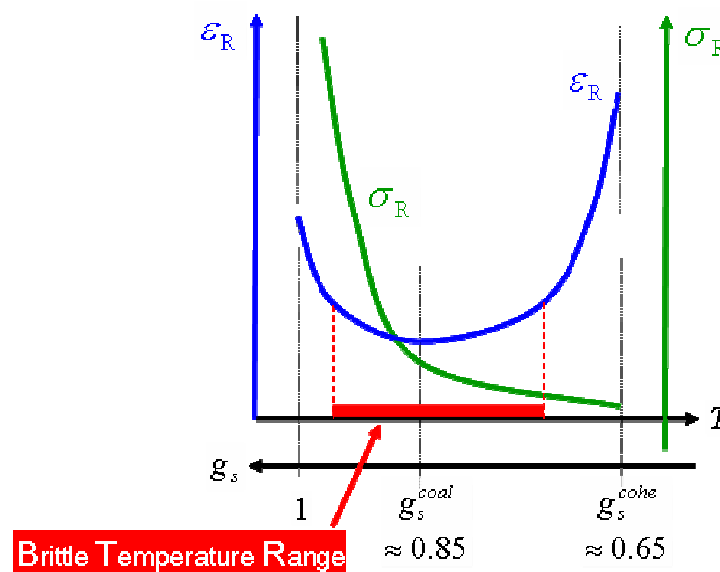


Figure 8 : représentation d'un BTR

En effet, ce BTR définit deux zones particulières, une première zone pour les hautes fractions solides, où la contrainte dans la structure devient importante. Cette contrainte va provoquer des ruptures au niveau des ponts solides ou des films liquides emprisonnés par la structure solide. La deuxième zone, au niveau de la densité de cohérence, représente le moment à partir duquel il devient difficile pour le liquide de circuler dans le réseau solide. Donc au-dessus de la température de cohérence le liquide pourra difficilement alimenter les porosités créées par les ruptures de films liquides.

Revenons sur l'analyse annoncée en introduction du document et qui vise à identifier le lieu où apparaissent les fissures dans une zone dendritique. Trois régions présentant des comportements différents vis-à-vis des sollicitations thermomécaniques peuvent être distinguées dans la zone semi-solide :

- La région 1 correspond au domaine de formation des dendrites primaires. Le liquide, présent en grande quantité, peut circuler aisément dans de vastes espaces interdendritiques.

- La région 2 correspond au domaine de maturation des structures dendritiques. Il y a donc eu nucléation et grossissement des dendrites jusqu'à une certaine température pour laquelle celles-ci se joignent et forment un réseau cohérent bien que non complètement solidifié

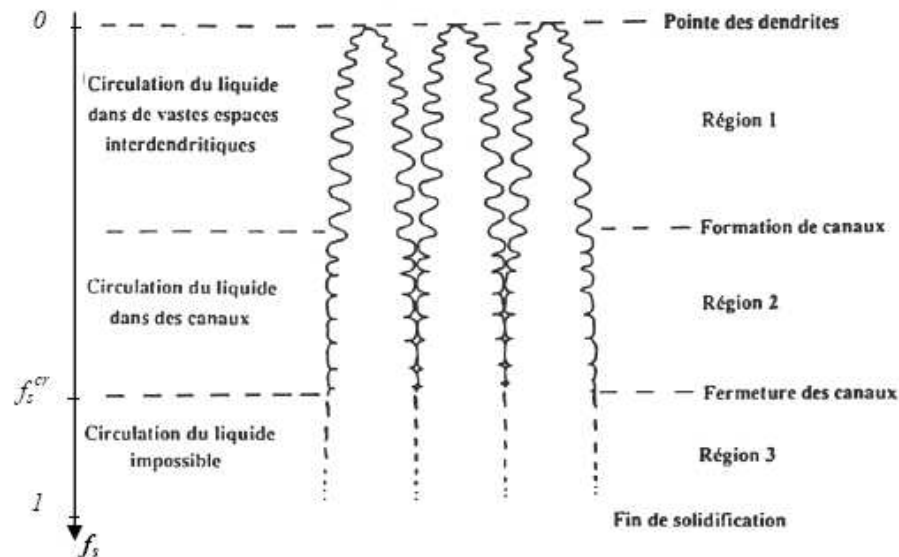


Figure 9: localisation de zones fragiles dans la phase pâteuse (source: Wintz [Wintz94])

La fissuration à chaud apparaît dès la rupture du film liquide présent entre des joints de grain. L'initiation d'un tel phénomène fait intervenir des interactions complexes entre aspect métallurgique et facteurs mécaniques, ces derniers étant directement influencés par les gradients de température provenant de la solidification. Comme schématisé sur la Figure 6, les interactions thermo-métallurgiques contrôlent la microstructure de solidification, tandis que les interactions thermo-mécaniques sont responsables des contraintes et déformations locales et globales.

La compréhension des phénomènes de fissuration passe par une bonne analyse des facteurs favorisant la fissuration à chaud. En réalité ces facteurs à proprement parler ne sont pas facilement identifiables, puisque couplés. Les principaux connus sont présentés ci-dessous.

2.2 Rôle des éléments chimiques

On sait que l'apparition de fissures est accrue avec la présence d'éléments d'alliages à bas point de fusion. Certains éléments tels que le soufre, le phosphore ou le bore favorisent en effet la formation d'un film liquide subsistant dans la phase finale de solidification, ce qui peut diminuer les propriétés mécaniques.

A. Rôle du soufre et du phosphore

Le soufre intervient par micro ségrégation, et son effet néfaste sur la résistance des aciers a été montré expérimentalement. A partir d'une certaine concentration, cet effet s'aggrave. En effet le soufre tend à abaisser la température de solidus, il influe donc sur la vitesse de disparition du liquide vers la fin de la solidification. Cette cinétique de disparition du liquide est d'autant plus lente que la concentration en soufre est élevée.

Malgré les différentes études réalisées sur l'influence du phosphore sur la fissuration, son influence reste difficilement quantifiable. [Matsuda88] démontre par exemple que pour des aciers faiblement alliés en chrome ou molybdène, le soufre est près de 2 fois plus influent que le phosphore. [Brooks83] observe par contre que, pour un acier à haute teneur en azote et manganèse, le phosphore est plus nocif que le soufre. En effet leur action sur le métal liquide semble différer. Quand le soufre tend à produire de fines gouttelettes de liquide, le phosphore favorise la formation de film liquide.

B. Rôle du manganèse

Le manganèse tend à réduire le risque de fissuration à chaud, car il tend à abaisser la nocivité du soufre en modifiant la morphologie des sulfures. Ceci a pour conséquence d'augmenter leur point de fusion. En effet les sulfures MnS ont une température de fin de précipitation plus élevée que les sulfures FeS ou CrS.

D'autre part selon la teneur en nickel, le manganèse peut être à l'origine d'une deuxième phase. Cette deuxième phase permettrait une solidification mixte plus résistante que la traditionnelle solidification austénitique.

C. Rôle du carbone

Des études ont montré que le flux thermique global extrait de la lingotière passe par un minimum pour des aciers moyen carbone (Figure 10b), ce mauvais transfert thermique s'accompagne d'une plus forte sensibilité au phénomène de crique (Figure 10a). Ce mauvais transfert thermique provient d'un décollement de la zone de peau des parois de la lingotière, la lame d'air ainsi formée servant d'isolant thermique.

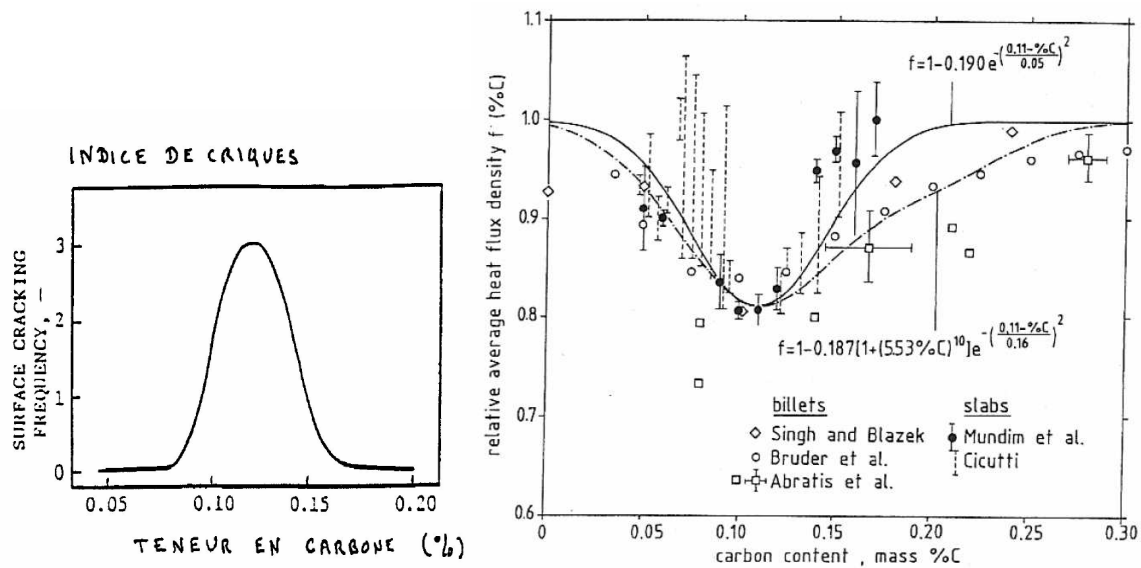


Figure 10: A gauche l'indice de criques en fonction de la teneur en carbone Brocard [Brocard01], à droite l'évolution du flux extrait en lingotière en fonction de la teneur en carbone

Voyons ici les hypothèses pouvant être formulées pour expliquer ce décollement. La solidification des aciers moyen carbone est une transformation fer delta – fer gamma (Figure 11). Cette transformation s'accompagne d'un retrait, la ferrite ayant une maille cubique centrée moins compacte que la maille cubique face centrée de l'austénite.

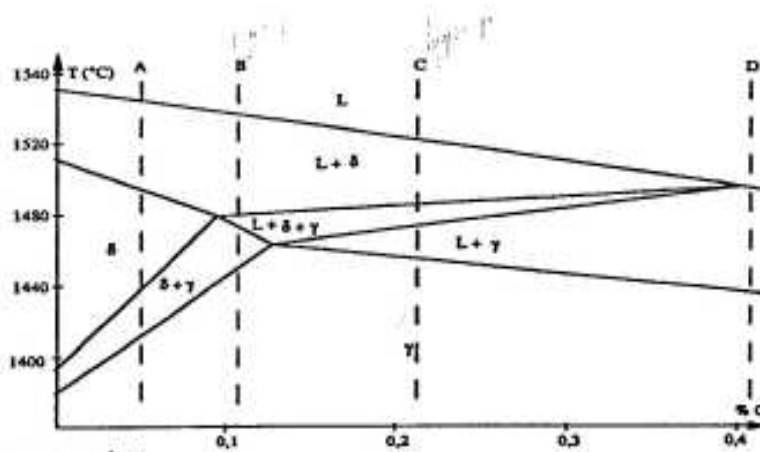


Figure 11: diagramme fer carbone

Dans le cas d'alliages dont la teneur en carbone est comprise entre 0,17% et 0,43%, la solidification commence en fer delta et se poursuit en austénite. La variation de volume en fin de solidification est moins importante que pour les aciers moyen carbone, et l'alimentation en métal liquide peut compenser en partie ce retrait.

2.3 Influence du mouillage

Cette propriété quantifiable par l'angle que fait une goutte liquide déposée sur un substrat solide permet de déterminer l'existence ou non d'un film liquide continu à la surface des dendrites. On détermine l'existence ou les caractéristiques d'un film à la mouillabilité du liquide sur le solide. La mouillabilité du liquide sur le solide est liée à la possibilité de cavitations. En fait, plus le liquide a tendance à former un film continu (c'est-à-dire plus il mouille la surface solide), plus la formation de porosité est favorisée.

L'angle que forme une goutte de liquide sur un solide est directement relié aux tensions de surface du joint de grain et de l'interface solide liquide. La Figure 12 montre la répartition du liquide autour des grains pour différentes valeurs d'angle diédral θ . L'angle diédral est défini par :

$$\gamma_{GB} = 2\gamma_{SL} \cos \theta \quad (2)$$

où γ_{SL} et γ_{GL} sont respectivement les énergies des surface liquide/solide et les énergies de surface des joints de grains

Fredriksson [Fredriksson79] montre que le mode de rupture varie en fonction de cet angle. Pour un angle nul, la rupture se fait le long d'un joint de grain mouillé, alors que pour un angle grand, même si la rupture apparaît au même endroit, le liquide qui se présente sous la forme de petites gouttelettes ne favorise pas cette rupture.

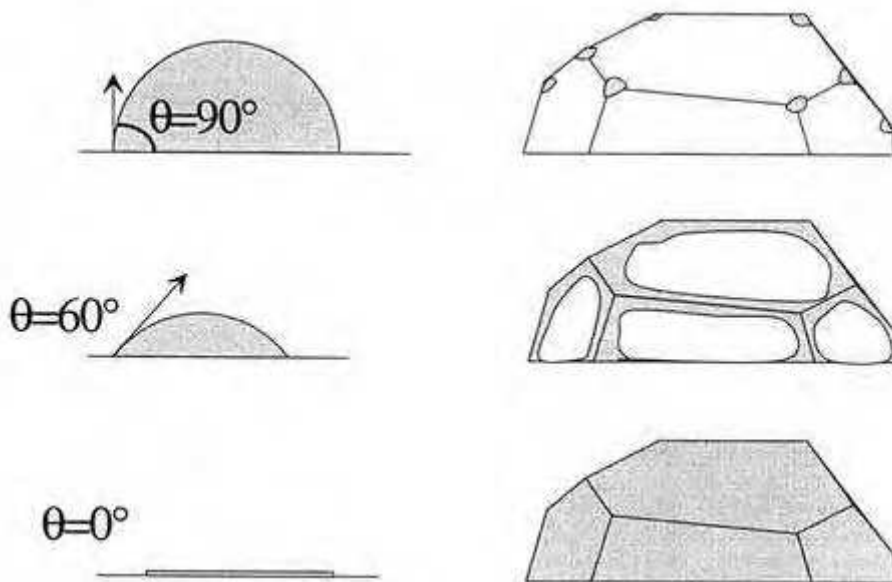


Figure 12: distribution de liquide aux joints de grains en fonction de l'angle diédral [Braccini00]

Nous venons de le voir, l'angle de mouillage revêt une importance particulière lors de la fissuration, et par conséquent la tension de surface. Plus précisément la tension de surface joue un rôle important dans la rupture d'un film liquide, c'est-à-dire dans la création

d'une interface liquide/vapeur. La force nécessaire pour séparer un film liquide placé entre deux plaques parallèles est donnée par : (1)

$$F = C \frac{\gamma_{GL} A}{e} \quad (2)$$

où A représente la surface en contact, γ_{GL} l'énergie de surface vapeur liquide et e l'épaisseur du film liquide. Donc le film liquide avec une forte tension surface sera plus résistant à la fissuration. D'autre part, d'un point de vue énergétique, un mécanisme de cavitation peut s'avérer plus favorable. Nous reviendrons sur la problématique des énergies de surface et de cavitation dans le chapitre traitant de dynamique moléculaire.

2.4 Facteurs métallurgiques:

A. La déformation

Le taux de déformation semble jouer un rôle important dans la fissuration à chaud. On peut donc imaginer une action de la déformation sur la fissuration à chaud n'est rien d'autre qu'une simple extension des théories de fracture dans les solides. Pellini [Pellini52] propose dans « strain theory » que la fissuration intervient lorsqu'un film liquide intergranulaire est déformé au-delà d'une valeur critique. De plus, le taux de déformation que supportera un film liquide dépend de l'intervalle de solidification ainsi que de la vitesse de refroidissement. De plus comme nous l'avons vu précédemment la présence de certains éléments d'alliage, a pour conséquence d'augmenter l'intervalle de solidification et donc d'exposer l'acier à une plus grande quantité de déformation.

C'est en se basant sur cette constatation que des critères de fissuration tels que [Prokhorov62] ont été proposés. Ceux-ci établissent des courbes de ductilité dans un intervalle de solidification. Ces courbes définissent la tolérance maximum avant que la fissuration n'intervienne et la fissuration intervient si la courbe de déformation intercepte la courbe de ductilité.

B. La contrainte

Puisque la contrainte et la déformation sont directement liées par la loi de comportement dans le cadre de la mécanique des milieux continus, des critères peuvent être construits en termes de contrainte. Comme le suggère le paragraphe sur la tension de surface, le film liquide possède une contrainte critique à partir de laquelle le film va s'ouvrir.

C. La vitesse de déformation

Des paragraphes précédents et plus particulièrement de l'analyse de l'influence de la déformation découle naturellement l'importance de la vitesse de déformation. En effet lorsque l'on reprend les analyses de Prokhorov, la vitesse de déformation apparaît tout naturellement. En fait cette dernière sert à déterminer quand un taux de déformation critique est atteint, en écrivant l'expression suivante :

$$\frac{d\varepsilon}{dT} = \frac{d\varepsilon}{dt} \times \frac{dt}{dT} = \frac{d\varepsilon}{dt} \times \left(\frac{dT}{dt} \right)^{-1} \quad (3)$$

Cette expression relie la vitesse de déformation $d\varepsilon/dt$ et le taux de refroidissement dT/dt .

2.5 Les critères de fissuration à chaud

Nous ne reviendrons pas dans ce paragraphe sur l'ensemble des critères de fissuration pouvant être rencontrés dans la bibliographie. En effet des études antérieures ont déjà permis de faire un état de l'art sur ces critères. Notamment [Cerri07], [Fabregue04] ont réalisé des études de synthèse sur ce thème.

Nous nous focaliserons seulement sur deux critères qui représentent deux courants de conception de la fissuration à chaud. Un premier modèle basé sur une pression critique de cavitation (modèle RDG [Rappaz99]), un second basé sur le cumul de déformation (type Yamanaka [Yamanaka90] ou WYSO [Won00]).

A. Le modèle RDG

Les défauts de solidifications sont considérés comme la résultante d'une chute de pression dans la zone liquide interdendritique. Cette chute de pression provient d'une part du rétrait provoqué par la solidification d'autre part de l'impossibilité d'alimenter la zone touchée par le retrait. La chute de pression est également due aux contraintes thermiques provoquées par le refroidissement. Dans un précédent modèle, Feurer [Feurer77] avait déjà tenté de prendre en compte ce phénomène en proposant un modèle comparant la vitesse de changement de volume dû au retrait de solidification à celle résultant de l'alimentation. Rappaz dans son modèle va plus loin en prenant en compte la contrainte associée à la contraction thermique. Cette contrainte thermique est limitée à la zone dendritique cohérente (région 2, Figure 9). En effet on considère que l'apparition des criques à chaud se fait principalement dans la zone liquide située à l'extrémité de la zone de cohérence.

En fait dans ce modèle, on estime un risque de fissuration à chaud lorsque la différence de pression due à cette déformation ajoutée à celle due au retrait de solidification atteint une valeur critique égale à la pression d'apparition d'une cavité. La base de ce modèle est la compétition existant entre la déformation subie par le squelette perpendiculairement au front de solidification et la facilité à alimenter en liquide cette zone.

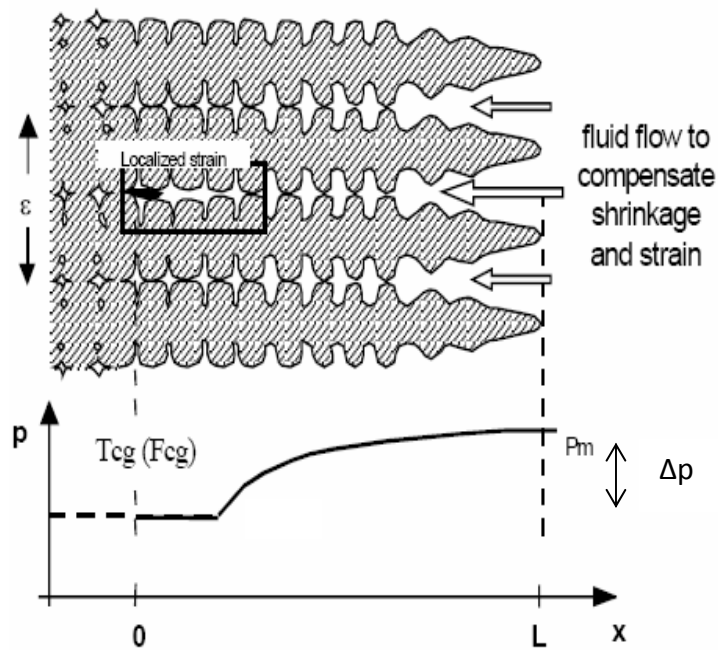


Figure 13 : représentation schématique montrant la localisation de la fissuration. Cette localisation est à en mettre en parallèle avec la chute de pression ainsi que la cohérence des dendrites [Drezet02]

Ce modèle suppose que le gradient thermique ainsi que la vitesse de solidification sont constants. De plus la structure dendritique est soumise à un taux de déformation. Pour limiter la formation de porosité, la zone située en fond de zone pâteuse doit pouvoir être alimentée en liquide. Lorsqu'on réalise le bilan des pressions auxquelles sont soumises les dendrites on peut observer un profil de pression comme celui présenté sur la Figure 13.

La pression au delà des dendrites est la pression métallostatique, celle-ci décroît au voisinage et à l'intérieur du réseau dendritique, et si cette dernière devient inférieure une pression critique P_c , une porosité pouvant dégénérer en fissure apparaît. On peut donc écrire

$$p = p_m - \Delta p \quad (4)$$

la fissure s'amorçant lorsque

$$P_{\min} = p_m - \Delta p < p_c \quad (5)$$

Or la dépression de la zone pâteuse comprend deux composantes, une première liée au retrait de solidification et une deuxième purement mécanique directement liée au procédé:

$$\Delta P_{\max} = \Delta P_{\text{ret}} + \Delta P_{\text{meca}} \quad (6)$$

le détail des expressions de pression due au retrait ΔP_{ret} et de pression purement mécanique ΔP_{meca} sont explicitées dans [Rappaz99] ou dans [Fabregue04].

B. Le modèle de WYSO

Le critère empirique de fissuration à chaud proposé par Won et al. [Won00], à la suite des travaux de Yamanaka [Yamanaka 91] se base lui aussi sur la déformation plastique cumulée, mais il prend aussi en compte l'influence de la vitesse de déformation ainsi que l'intervalle de fragilité de l'alliage (BTR). La condition d'apparition d'une fissure s'écrit :

$$\Delta_{BTR} \mathcal{E} \geq \Delta \mathcal{E}_c \quad (7)$$

où $\Delta_{BTR} \mathcal{E}$ est la *déformations cumulées dans le BTR* et $\Delta \mathcal{E}_c$ la déformation critique. Cette dernière dans la formulation du critère WYSO prend la forme suivante :

$$\Delta \mathcal{E}_c = \frac{\varphi}{\dot{\mathcal{E}}^{m^*} BTR^{n^*}} \quad (8)$$

les coefficients φ , n et m ont été identifiés à partir d'essais effectués sur différentes nuances d'acier : $\varphi = 0.02821$, $m^* = 0.3131$ et $n^* = 0.8638$. On peut noter que la valeur de la déformation critique diminue avec l'augmentation de la vitesse et du BTR.

L'expression générale du critère, telle qu'elle a été formulée par Cerri dans sa thèse, peut s'écrire :

$$HCC_{WYSO}^{elt} = \max_{T \in BTR} \left(\int_{t_0}^t \hat{\mathcal{E}}^{elt}(\zeta) d\zeta - \frac{\varphi}{\hat{\mathcal{E}}^{m^*} BTR^{n^*}} \right) \quad (9)$$

ce qui peut s'écrire pour un incrément donné :

$$HCC_{WON}^{elt,incr} = \max_{T \in BTR} \left(\sum_{i=1}^{incr} \hat{\mathcal{E}}_i^{elt} \Delta t_i - \frac{\varphi}{\hat{\mathcal{E}}^{m^*} BTR^{n^*}} \right)$$

Dans cette dernière expression, on note la présence de $\hat{\mathcal{E}}$, qui représente une déformation cumulée perpendiculaire au gradient de température. Sa justification et sa description sont présentées dans [Cerri07]. En effet dans Won et al., la nature de la déformation à prendre en compte pour le critère de déformation n'est pas clairement précisée. En effet il peut s'agir soit d'une déformation moyenne sur le BTR soit le max de la déformation rencontrée sur ce même BTR.

Dans cette formulation, on compare une déformation cumulée et une capacité instantanée, ce qui permet de détecter tout cas très défavorable et sera donc très conservateur. Cette formulation sera également très sensible aux variations de vitesses de déformation.

Sur cette on peut proposer deux nouvelles formulations, un peu moins défavorables, dans lesquelles on moyenne les vitesses de déformation

$$HCC_{WYSO1}^{elt} = \int_{t0}^t \hat{\epsilon}^{elt}(\zeta) d\zeta - \frac{\varphi}{moy(\hat{\epsilon})^{m^*} BTR^{n^*}}$$

ce qui peut s'écrire pour un incrément donné :

$$HCC_{WYSO1}^{elt,incr} = \sum_{i=1}^{incr} \hat{\epsilon}_i^{elt} \Delta t_i - \frac{\varphi}{\left(\frac{1}{\sum_{i=1}^{incr} \Delta t_i} \sum_{i=1}^{incr} \hat{\epsilon}_i^{elt} \Delta t_i \right)^{m^*} BTR^{n^*}} \quad (10)$$

Dans cette dernière formulation la valeur à l'incrément n+1 remplace la valeur de celle à l'incrément n. On peut alors envisager une formulation gardant l'esprit du maximum à estimer sur le BTR:

$$HCC_{WYSO2}^{elt} = \max_{incr \in BTR} (HCC_{WYSO1}^{incr,elt}) \quad (11)$$

3. Analyse des capacités de la simulation numérique pour la prédiction de la fissuration à chaud.

La simulation numérique des phénomènes de fonderie apparaît comme un outil complémentaire à une approche expérimentale, pour la détermination du cadre thermomécanique local pouvant entraîner des défauts comme la fissuration à chaud.

Cette partie a pour objectif, après une brève présentation des phénomènes thermiques mécaniques et métallurgiques mis en jeu lors des procédés de fonderie, d'étudier la sensibilité de la simulation éléments finis à certains paramètres critiques pour la fissuration, tels que la rhéologie ou la pression de cavitation.

3.1 La simulation numérique des gradients thermiques

A. Conduction thermique volumique

La connaissance du comportement thermique est indispensable pour calculer la distribution des températures lors de la solidification. Ce calcul consiste à résoudre l'équation de la chaleur en se donnant des conditions aux limites d'apport ou de perte de chaleur. Cette dernière découle de la conservation de l'énergie décrite par le premier principe de la thermodynamique qui postule que la variation de l'énergie interne \dot{q} du système est égale à la somme des puissances des efforts extérieurs et calorifique échangées avec l'extérieur :

$$\rho \frac{dh}{dt} = \sigma : \dot{\epsilon} - \nabla \cdot \Phi + w, \quad (12)$$

où $\dot{\epsilon}$ est le tenseur des vitesses de déformation,

σ est le tenseur des contraintes,

ρ la masse volumique du matériau

Φ le vecteur flux de chaleur

w une source volumique de chaleur

Le comportement thermique est en général modélisé par la loi de Fourier qui exprime le flux de chaleur en fonction du gradient de température

$$\Phi = -k \nabla T, \quad (13)$$

Où k est la conductibilité thermique du matériau.

B. Échanges thermiques surfaciques

a) La convection

Il s'agit d'un phénomène macroscopique de transfert de chaleur par transport dans un fluide en mouvement. La convection est due à l'action simultanée des différences de température qui existent dans le milieu et d'un champ de forces massiques.

$$-k \nabla T \cdot \mathbf{n} = h_c (T - T_{ext}), \quad (14)$$

Où T_{ext} est la température milieu environnant, h_c est le coefficient d'échange thermique entre les pièces et le milieu environnant.

b) La conduction

La conduction entre des pièces et d'autres pièces ou entre des pièces et des outils peut s'exprimer :

$$-k \nabla T \cdot \mathbf{n} = h_a (T - T_t), \quad (15)$$

Où T_t est la température des outils ou des pièces en contact, h_a est le coefficient d'échange thermique entre pièces et outils

c) Rayonnement thermique

Le rayonnement thermique est un échange d'énergie par ondes électromagnétiques émises par la matière sur des longueurs d'ondes étendues (des UV à l'IR). Le rayonnement thermique d'une surface est décrit par la loi de Stefan-Boltzmann :

$$-k \nabla T \cdot \mathbf{n} = \varepsilon_r \sigma_B (T^4 - T_{ext}^4) \quad (16)$$

Où $\sigma_B = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W.m}^{-2} \text{ K}^{-4}$ est la constante Stefan-Boltzmann, ε_r l'émissivité, T la température sur la surface libre et T_{ext} la température ambiante.

3.2 Simulation numérique du comportement mécanique

Une pièce subissant une opération de fonderie ou de soudage, passe par toutes les étapes de la solidification : liquide, pâteux et solide. La littérature, dans le domaine de la simulation des procédés de solidification est très large. Elle propose des comportements simples élasto-plastiques ou élasto-viscoplastiques. Les approches peuvent être différentes :

1. Le comportement du matériau peut être considéré comme constant tout au long de la solidification. En fait que la pièce soit liquide ou à température ambiante elle conservera le même type de comportement mécanique.
2. Un comportement mécanique différent peut-être associé à chaque état du matériau lors du refroidissement [Vicente-Hernandez94], [Drezet96], [Decultieux96]. Ce changement de comportement qui est particulièrement simple lors du passage à l'état liquide, est plus ambigu pour un passage solide-pâteux. Classiquement ce qui est proposé est d'introduire une température critique marquant la transition solide-pâteux. Certains considèrent la température de cohérence [Nakagawa95]. Mais cette valeur est discutable car la température de transition peut dépendre du mode de sollicitation plus complexe qu'un simple essai de traction, du type de matériau. Selon certains auteurs on peut considérer que le matériau perd tout caractère élastique au moment du passage de la température de solidus. D'autres considèrent une valeur intermédiaire située entre T_{sol} et T_{coh} .

Comme l'ont montré [Jaouen98], [Decultieux96] et [Vicente-Hernandez 94] dans leurs travaux, l'utilisation d'une loi élasto viscoplastique (EVP) pour l'ensemble des phases ne semble pas être un choix judicieux. En effet un tel modèle implique que pour avoir des déformations élastiques négligeables, le module d'Young doit être élevé. Hors dans leurs travaux sur des alliages d'aluminium [Decultieux96] et [Vicente-Hernandez94] ont montré que celui-ci avait tendance à décroître fortement avec la température (il en est de même pour des aciers). Donc l'utilisation d'une seule loi de comportement nécessite un saut du module d'Young lorsqu'on passe de la phase solide à une phase pâteuse. Notre démarche suivra donc celle déjà initiée par [Jaouen 98], [Decultieux96] et [Vicente-Hernandez94], c'est à dire appliquer une loi de comportement différente pour chaque état de matière. La figure présentée ci après, résume l'approche développée dans THERCAST suite aux travaux de [Jaouen98], [Decultieux96] et [Vicente-Hernandez94]. En fait au cours du refroidissement, on peut distinguer trois zones :

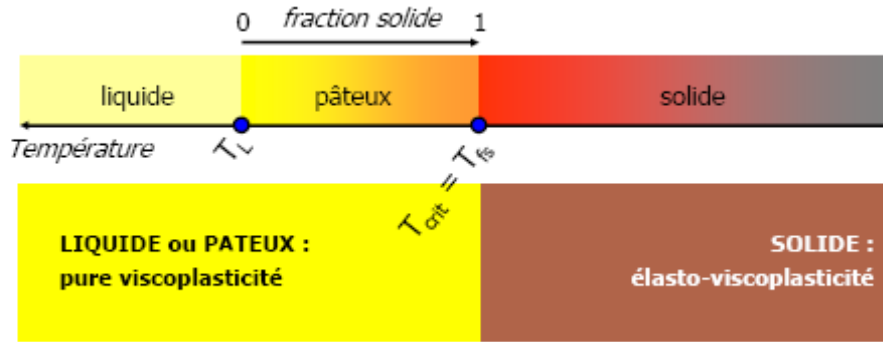


Figure 14 : comportement mécanique de matière en fonction de son état (Cerri07)

- une zone fluide au dessus de la température de liquidus, durant laquelle le matériau à un comportement newtonien (en fait ce comportement n'est autre qu'un cas particulier du comportement viscoplastique (VP))
- Dans la zone solide le matériau obéit à une loi EVP.
- Entre les deux zones, il obéit à une loi VP. Il est à noter que la frontière entre l'EVP et le VP n'est pas évidente. Ce point est développé dans la thèse de [Vicente-Hernandez94]. En fait soit le matériau conserve une part d'élasticité malgré la présence d'une fraction liquide au milieu de solide, soit même en dessous de la température de solidus, dans la zone pâteuse, le matériau à E très faible et il peut ainsi être considéré comme VP.

A. Comportement de la phase solide

Le problème mécanique est régie par l'équation de conservation du mouvement, qui peut être exprimé si on en néglige les forces d'inertie par:

$$\nabla \cdot \sigma + \rho f = 0 \quad (17)$$

où σ est le tenseur des contraintes, et f est la densité de forces externes par unité de masse. En dessous de la température du solidus, on considère un modèle thermo-élastique visco-plastique dans lequel intervient des termes de dilatation thermique. En négligeant les termes provenant de la variation de module en fonction de la température, le tenseur des taux de déformation s'écrit alors :

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}^e + \dot{\epsilon}^{vp} + \dot{\epsilon}^{th} \quad (18)$$

où $\dot{\epsilon}^e, \dot{\epsilon}^{vp}, \dot{\epsilon}^{th}$ sont respectivement la partie élastique, la partie visco-plastique et la partie thermique. La partie élastique est définie par la loi de Hooke et la partie thermique est directement proportionnelle à la variation de température. La vitesse de déformation

viscoplastique est quant à elle, liée au déviateur des contraintes de von Mises. L'ensemble des lois de comportement régissant un comportement thermo élastique viscoplastique peut s'écrire:

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e &= \frac{1+\nu}{E} \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \frac{\nu}{E} tr(\dot{\boldsymbol{\sigma}}) \mathbf{Id} \\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{th} &= \alpha \dot{T} \mathbf{Id} \\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} &= \frac{3\dot{\bar{\varepsilon}}}{2\bar{\sigma}} \mathbf{s}\end{aligned}\tag{19}$$

Ici, ν et E sont respectivement le coefficient de Poisson et le module de Young. \mathbf{Id} désigne le tenseur identité. Dans le terme viscoplastique, \mathbf{s} est la partie déviatorique du tenseur des contraintes. De cette expression se déduit le tenseur des contraintes de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$:

$$\mathbf{s} = \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3} tr(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{Id}\tag{20}$$

Le taux de déformation équivalent de von Mises $\dot{\bar{\varepsilon}}$ et la contrainte équivalente $\bar{\sigma}$ sont respectivement définis par:

$$\dot{\bar{\varepsilon}} = \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{ij}^{vp} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{ij}^{vp}} \quad \text{et} \quad \bar{\sigma} = \sqrt{\frac{3}{2} \mathbf{s}_{ij} \mathbf{s}_{ij}}\tag{21}$$

Donc nous pouvons écrire la relation reliant le taux de déformation viscoplastique à la partie déviatorique des contraintes

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} = \frac{3}{2\bar{\sigma}} \left\langle \frac{\bar{\sigma} - \sigma_y - H\bar{\varepsilon}^n}{K} \right\rangle^{1/m} \mathbf{s}\tag{22}$$

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} = \frac{3}{2\bar{\sigma}} \left\langle \frac{\bar{\sigma} - \sigma_y}{K\bar{\varepsilon}^n} \right\rangle^{1/m} \mathbf{s}\tag{23}$$

Dans les équations précédentes, le terme entre crochet s'annule dans le cas où l'expression qu'il contient devient négative.

Ces deux équations peuvent s'écrire sous la forme d'invariants :

L'équation (22) devient la loi additive: $\bar{\sigma} = \sigma_y + H\bar{\varepsilon}^n + K\dot{\bar{\varepsilon}}^m$

L'équation (23) devient la loi multiplicative: $\bar{\sigma} = \sigma_y + K\dot{\bar{\varepsilon}}^m \bar{\varepsilon}^n$

B. Comportement mécanique à l'état liquide

La zone liquide du matériau est traitée comme obéissant à un comportement newtonien pouvant subir des dilatations thermiques. Le tenseur des taux de déformations total $\dot{\epsilon}$ s'écrit alors :

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}^{th} + \dot{\epsilon}^{newt} \quad (24)$$

Où $\dot{\epsilon}^{newt}$ est le tenseur du taux de déformation newtonien, ce dernier s'écrit :

$$\dot{\epsilon}^{newt} = \frac{1}{2\mu_{newt}(T)} \mathbf{s} \quad (25)$$

Où μ_{newt} est la viscosité dynamique à la température T. En considérant les forces d'inertie, et la gravité, l'équation fondamentale de la dynamique peut s'écrire comme l'équation de Navier-Stokes :

$$\nabla \cdot \mathbf{s} - \nabla p + \rho \mathbf{g} = \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (26)$$

C. Extrapolation à l'état pâteux

Dans notre modèle nous considérons que le comportement mécanique est continu sur toute la gamme de température étudiée. C'est-à-dire qu'il existe une continuité du comportement entre la zone élasto-viscoplastique et la zone newtonienne. Puisque le comportement newtonien est un exemple particulier de comportement viscoplastique, la zone pâteuse est par conséquent traitée avec un comportement viscoplastique.

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}^{th} + \dot{\epsilon}^{vp} \quad (27)$$

Où $\dot{\epsilon}^{vp}$ est le tenseur du taux de déformation viscoplastique, ce dernier s'écrit :

$$\dot{\epsilon}^{vp} = \frac{3}{2K_{vp}(T)} \dot{\epsilon}^{1-m} \mathbf{s} \quad (28)$$

Où K_{vp} est la consistance viscoplastique à la température T.

3.3 Etudes des paramètres influents sur les critères de fissuration à chaud

A. Influence de la rhéologie sur le comportement mécanique des zones critiques.

La première étude de sensibilité que nous avons réalisée concerne l'influence des paramètres rhéologiques sur les résultats d'une simulation de solidification. Nous avons

considéré un matériau 100Cr6 possédant une rhéologie initiale donnée. Cette rhéologie a été modifiée d'environ 10%, une première fois elle a été modifiée à la baisse, une seconde fois à la hausse. Les rhéologies des trois variantes sont présentées ci-dessous.

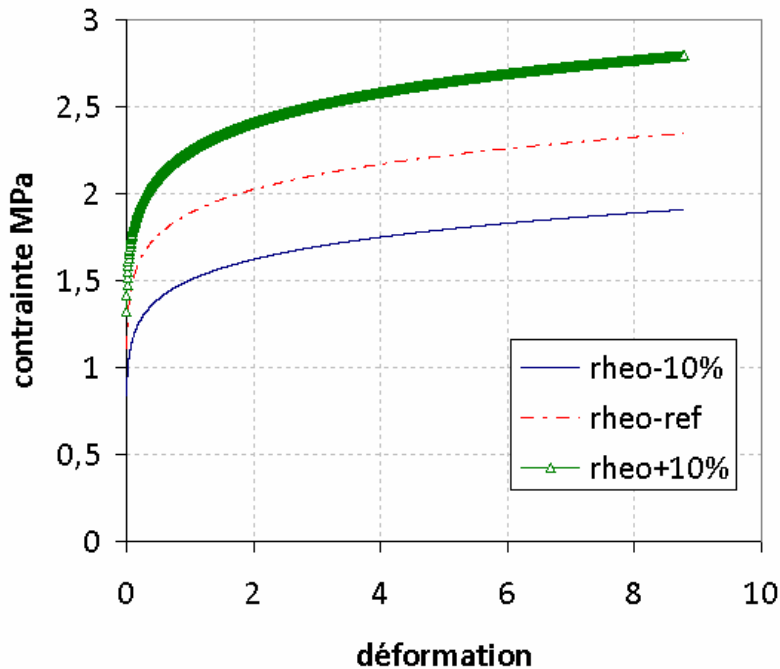


Figure 15: courbe contrainte déformation du 100Cr6 à 1367°C

Pour ces trois jeux de paramètres le même calcul en solidification a été exécuté. Nous avons considéré comme loi rhéologique de base celle du 100Cr6 utilisée dans Thercast [Coste 04] [Cerri07].

Nous considérons la géométrie du moule du dispositif Crickacier [Cerri07], rappelée par la Figure 16. Comme le montre cette figure, la pièce était instrumentée de 4 thermocouples placés à des endroits stratégiques. Nous avons placé des capteurs numériques aux mêmes positions non pas pour relever la température en ces points mais pour étudier le comportement mécanique en ces points et surtout estimer l'influence d'une légère modification de la loi de comportement sur la réponse mécanique en ces points.

Tout d'abord étudions le comportement mécanique de certaines zones déjà solidifiées. Même si le risque de fissuration est normalement contenu dans le pâteux, les zones solides ont une influence non négligeables. En effet elles vont jouer un rôle mécanique sur les zones pas totalement solidifiées et donc provoquer la fissuration.

D'autre part ces simulations peuvent nous permettre de déterminer les taux de déformation et vitesses de déformations rencontrées dans le solide. Ces valeurs pourront s'avérer utiles dans le dimensionnement des essais rhéologiques.

3. Analyse des capacités de la simulation numérique pour la prédiction de la fissuration à chaud.

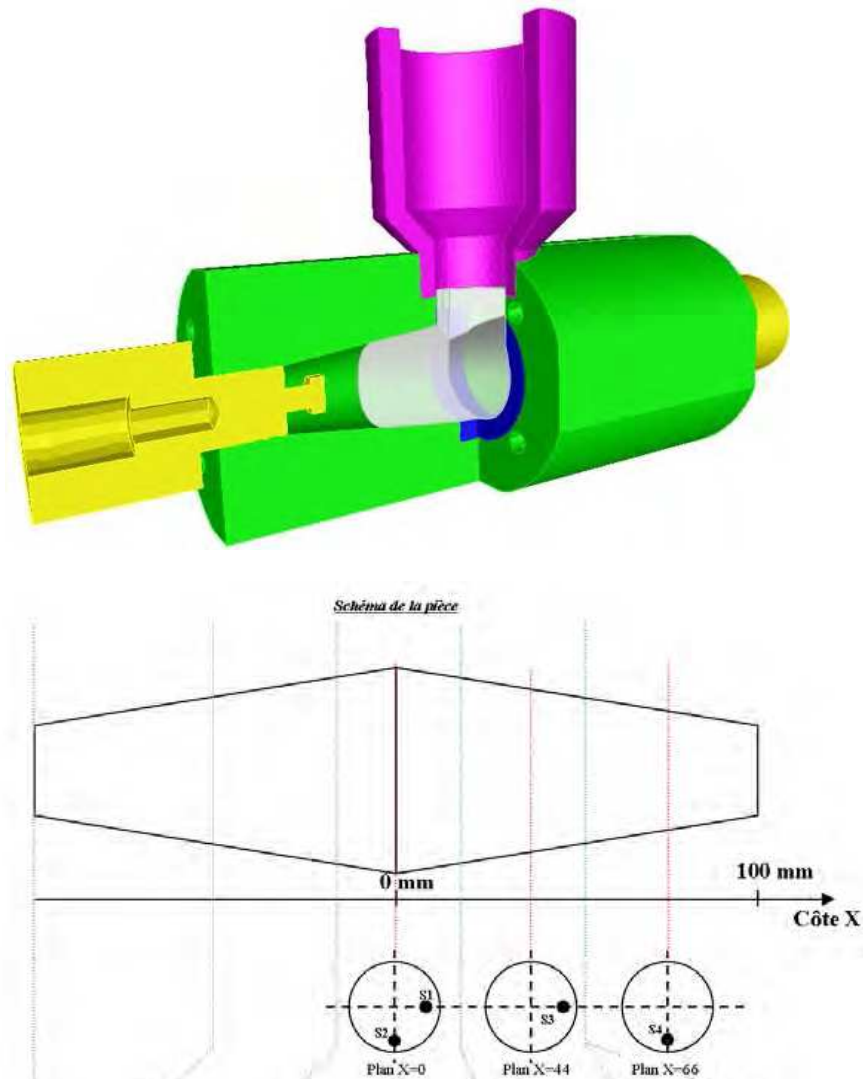


Figure 16: Vue du dispositif crickacier (haut), position des thermocouples dans le lopin métallique (bas)

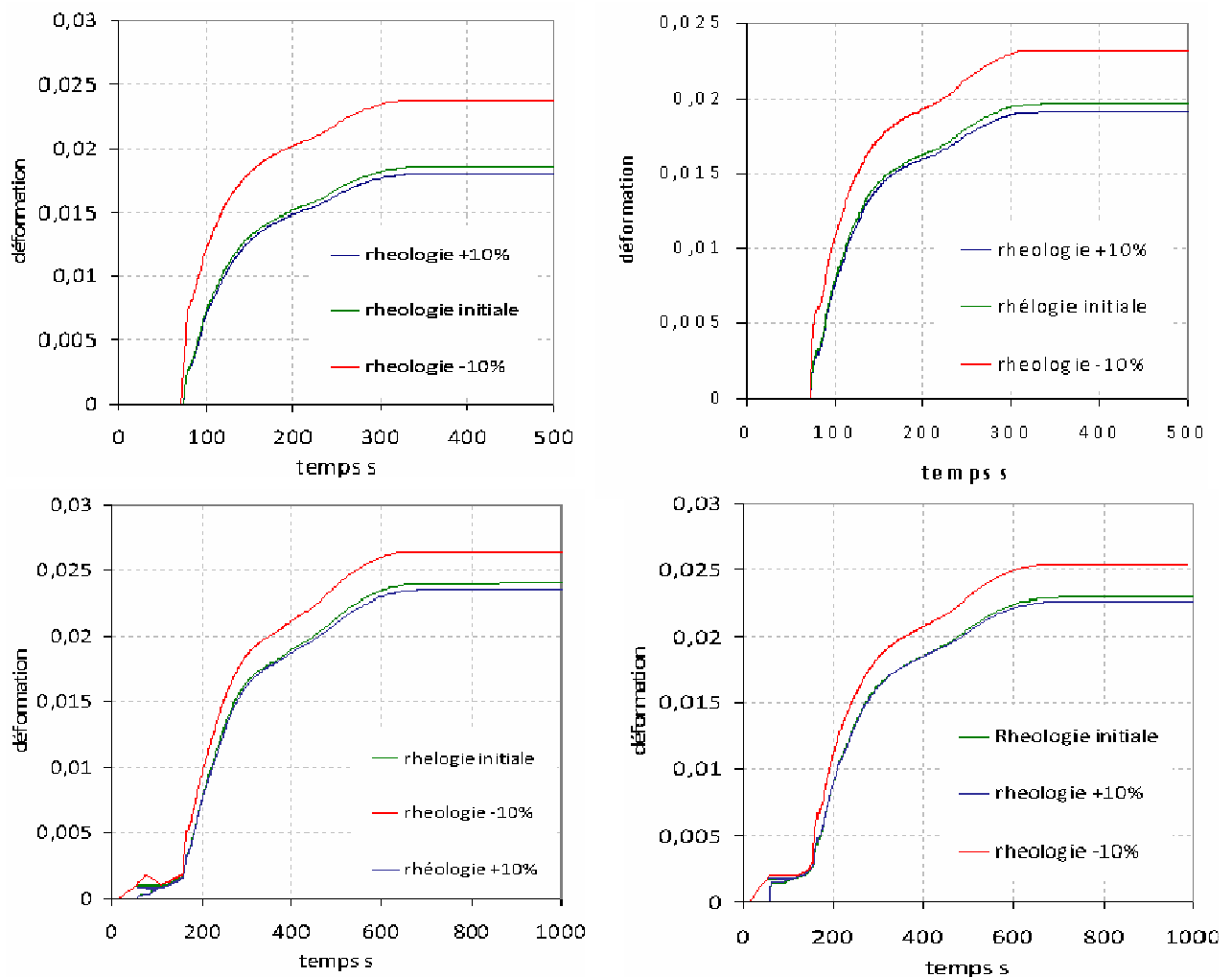


Figure 17: évolution de la déformation au cours du temps pour les quatre capteurs.

Comme le montre la Figure 17 sur laquelle est représentée l'évolution de la déformation plastique équivalente pour les quatre capteurs décrits précédemment. On peut noter que de petites perturbations sur la rhéologie ont des conséquences assez importantes sur la valeur de la déformation et donc sur la prédiction de la fissuration à chaud. En effet on remarque que si la rhéologie est diminuée de 10%, la variation sur la déformation va être comprise entre 10 et 25% selon les zones.

On constate qu'une rhéologie plus »raide n'influe que peu les déformation calculées (très légèrement inférieures à celles calculées pour la simulation de référence). En revanche, une rhéologie moins raide provoque une augmentation assez significative des déformations (entre 10 et 25%).

On note que les niveaux de déformations sont très faibles, de même la vitesse de déformation locale, évolue sur des niveaux eux aussi très faibles (entre $2,5 \times 10^{-5} s^{-1}$ et $5 \times 10^{-5} s^{-1}$).

On se propose maintenant de comparer les valeurs de critère de fissuration de Won à la fin de la zone pâteuse. Ce critère, on le rappelle cumule les déformations dans la direction

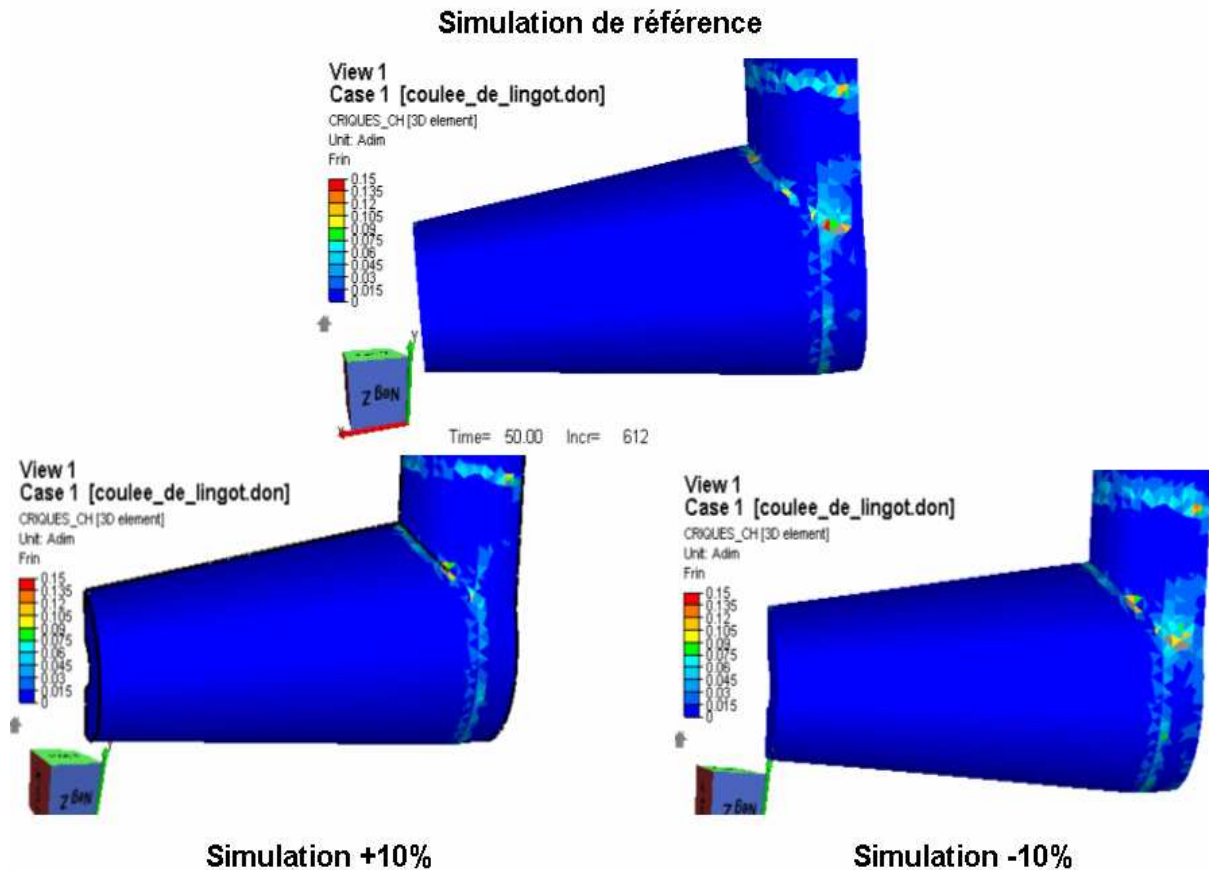


Figure 19: étude de l'influence de la rhéologie sur le critère de fissuration

Par conséquent la précision de la loi de comportement est de tout premier ordre pour des critères de fissuration basés sur la déformation tel que le critère de WYSO.

Si maintenant on considère un critère de type RDG basé sur une pression critique nécessaire à l'apparition d'une cavité, la rhéologie prend là aussi tout son sens. Comme le montre Figure 17, où nous avons maintenant étudié l'influence de la rhéologie sur la pression, nous remarquons là aussi que la rhéologie influe fortement sur la pression. Même si les critères macro, tels que ceux présentés ici n permettent une discrimination claire entre des états fissurants et non fissurants, on note néanmoins que la rhéologie à une influence non négligeable sur l'évaluation du risque fissurant de certaines zones.

3. Analyse des capacités de la simulation numérique pour la prédiction de la fissuration à chaud.

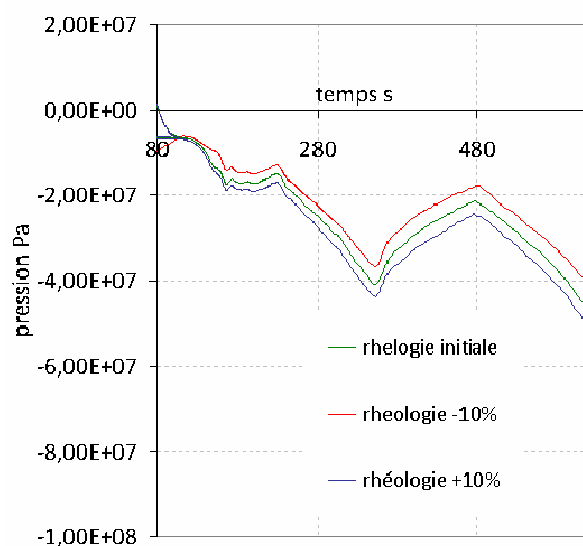


Figure 20: évolution de la pression pour différentes rhéologies.

Simulation de référence

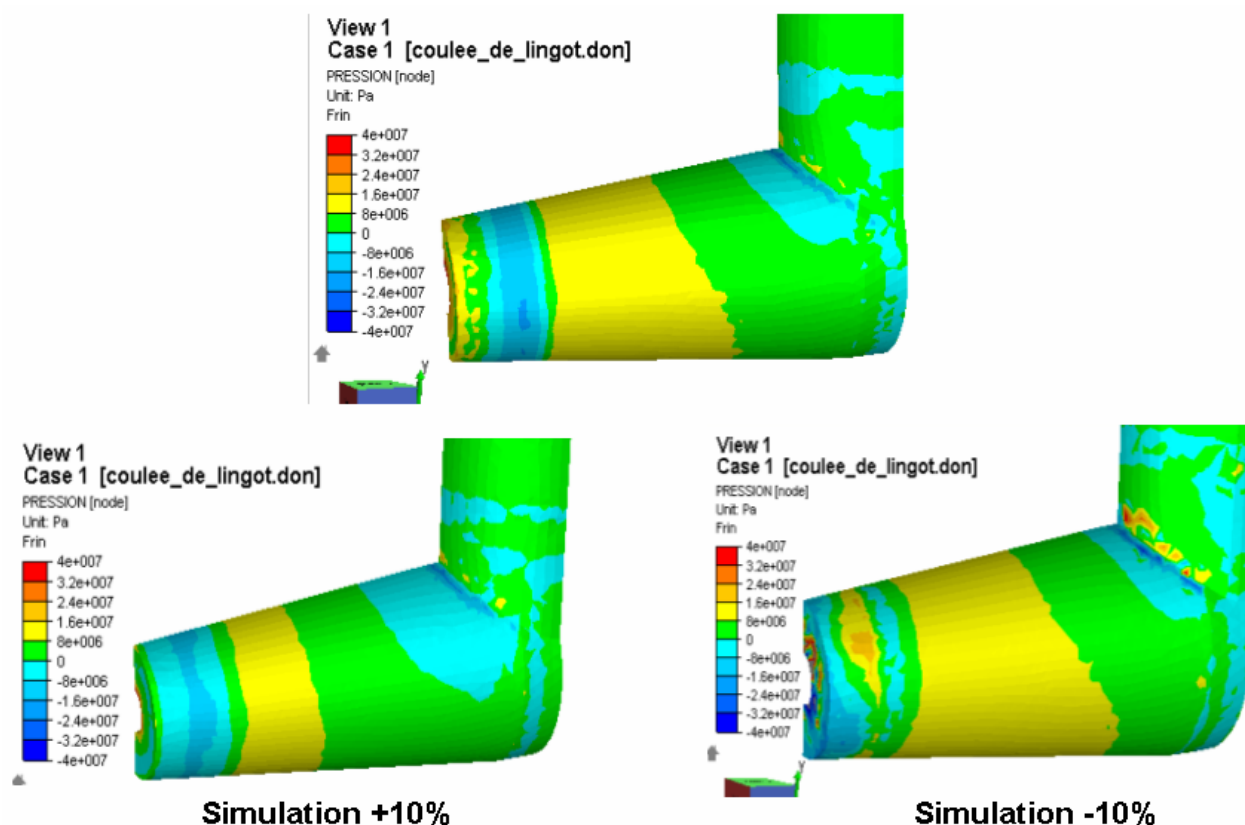


Figure 21: étude de l'influence de la rhéologie sur le champ de pression

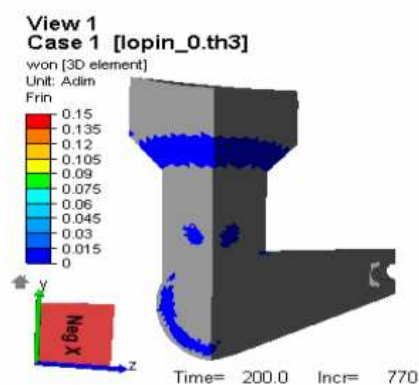
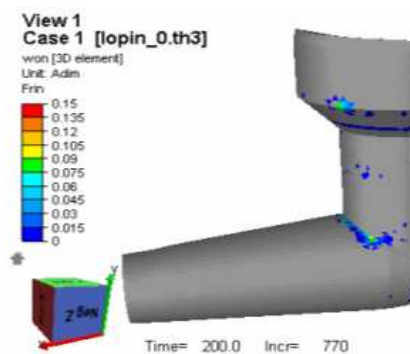
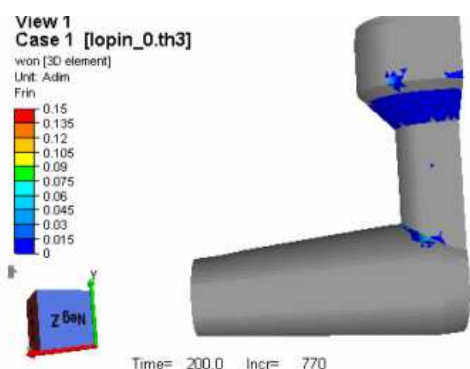
B. Influence des paramètres internes sur les critères

Le paramètre qui semble de première importance dans le critère de WYSO, semble être l'étendue du BTR. En effet c'est uniquement durant cet intervalle que chaque élément va cumuler des déformations pour le critère de fissuration. Donc voyons numériquement à la Figure 22 quelle est l'influence du BTR sur le critère de fissuration.

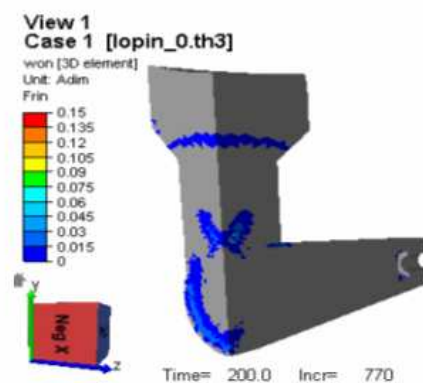
Comme l'avait déjà noté Bellet et al dans [Bellet09], les valeurs limites du BTR à une influence non négligeable sur le critère de fissuration. Ici, on constate qu'une hausse du BTR de 35% (c'est-à-dire 15°C) a pour conséquence une hausse significative du HCC, le nouvel $HCC = 1.25 \times HCC_{ref.}$. De même une baisse du BTR de 35% (c'est-à-dire une baisse de 14°C) va entraîner aussi une baisse significative du HCC, $HCC = 0.57 \times HCC_{ref.}$. En conclusion le BTR est un paramètre crucial mais dont les bornes sont difficiles à déterminer. Par conséquent nos observations sont identiques à celles décrites dans [Bellet09].

Pour le critère de RDG, la valeur importante est la pression critique à partir de laquelle on considère qu'il existe un risque d'apparition d'une cavité pouvant dégénérer en fissure. Cette pression, est très difficile à mesurer et est directement reliée à des problèmes de tension de surface.

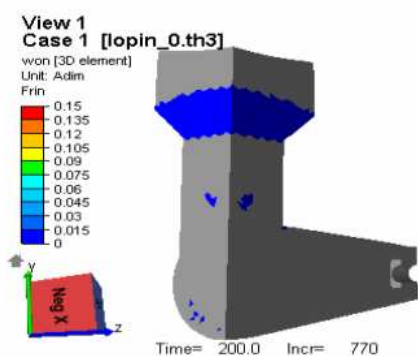
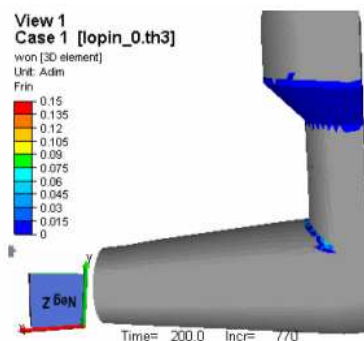
3. Analyse des capacités de la simulation numérique pour la prédiction de la fissuration à chaud.



BTR = 40°C, $F_s=0,9-0,99$



BTR = 55°C, $F_s=0,85-0,99$



BTR = 26°C, $F_s=0,95-0,99$

Figure 22: étude de l'influence du BTR sur la valeur du critère de WYSO.

4. Conclusions et discussion

Comme nous l'avons vu tout au long de ce chapitre, la compréhension des phénomènes de fissuration à chaud est complexe, car elle nécessite de comprendre des multiples phénomènes, le plus souvent couplés mais aussi de connaître des grandeurs physiques difficilement accessibles

Nous pourrions comme cela a été fait dans [Cerri07] nous baser uniquement sur des critères de fissuration et sur des essais de criquabilité pour déterminer des paramètres nécessaire à la prédiction des fissures. Cette approche bien que pertinente s'avère être insuffisante et ce pour plusieurs raisons :

- D'une part comme nous avons pu le montrer précédemment, la prédiction du risque de fissure est très étroitement liée aux paramètres utilisés pour les simulations. Au premier rang desquels les paramètres rhéologiques. Mais pour être pertinente cette rhéologie doit être connue dans un domaine de température, de déformation et de vitesse de déformation qui est le plus proche des conditions de solidification. Il s'agit d'un domaine pour lequel la littérature s'avère être très pauvre en données. C'est pourquoi nous nous sommes intéressés à la caractérisation rhéologique des aciers dans de telles conditions.
- D'autre part si la rhéologie s'avère être absolument nécessaire pour une meilleure prédiction à l'échelle macroscopique, les phénomènes provoquant la fissuration sont eux mésoscopiques et même plutôt microscopiques. La fissuration se produisant dans un domaine interdendritique, comme le montre la Figure 13 , le problème d'échelle est très important, et les échelles sont très faibles. Ceci est vrai pour la fissuration à chaud, mais c'est aussi vrai pour l'ensemble des problèmes de croissance de grain ou de dendrites. Ces phénomènes sont le plus souvent simulés à partir de méthode level-set ou champ de phase. Comme l'a montré [Hoyt 09], les interfaces décrites par ces méthodes sont au moins deux décades supérieures aux échelles réelles. C'est une des raisons qui nous a amené à nous intéresser à la simulation dynamique moléculaire. L'autre raison étant que des notions comme la mouillabilité, la tension de surface, la pression de cavitation ou la rupture de film liquide interdendritique, sont difficilement observables, mesurables ou quantifiables. C'est en cela que l'apport microscopique prend tout son sens.

Bibliographie

- [Bellet 09] M. Bellet, O. Cerri, M. Bobadilla, Y. Chastel, (2009) Modeling of hot tearing during solidification of steels: assessment and improvement of macroscopic criteria through the analysis of two hot tearing tests, *Metallurgical and Materials Transactions A*, **40**, 2705-2717
- [Borland60] : J. Borland, (1960), Generalized theory of super-solidus cracking in welds (and casting) , *British Welding Journal*, **7**, pp.508.
- [Braccini00] : M. Braccini, (2000), Optimisation des pièces moulées : Etude des phénomènes defissuration à chaud dans les alliages Al-Cu, thèse de doctorat, *Thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble*.
- [Brocard01] : L. Brocard, (2001), etude thermomécanique du premier voile solidifié en coulée continue d'acier , *Rapport de stage, IRSID* .
- [Brooks83] J.A. Brooks, A.W. Thomson, J.C. Williams, variation in weld ferrite content due to P and S, *Welding Journal*, aout 1983, pp 220.
- [Cerri07] : O. Cerri, (2007), Rupture à chaud dans les aciers au cours de leur solidification. Caractérisation expérimentale et modélisation thermomécanique, thèse de doctorat, *Mines ParisTech, CEMEF*.
- [Coste04] : F. Coste, (2004), Modélisation thermomécanique

tridimensionnelle par élément finis de la coulée continue d'aciers, thèse de doctorat, *Mines-ParisTech, CEMEF*.

[Dahle96] : A.K. Dahle, L. Arnberg, (1996), Overview : the rheological properties of solidifying aluminium foundry alloys, *JOM*, **48**, pp.34.

[Decultieux96] : F. Decultieux, (1996), Caractérisation du comportement thermomécanique d'alliages de fonderie pendant la solidification. Application à la prévision des défauts de rupture et à la modélisation des transferts de chaleur entre, thèse de doctorat, *Mines-ParisTech, CEMEF*.

[Drezet02] : J.-M. Drezet, M. Gremaud, M. Graf, R. Gaumann, (2002), A new hot tearing criterion for steel, *Proceedings of the 4th European Continuous Casting Conference*.

[Drezet96] : J.M Drezet, (1996), Direct chill and electromagnetic casting of aluminium alloys: Thermomechanical effects and solidification aspects, thèse de doctorat, *Ecole Polytechnique fédérale de Lausanne*.

[Eskin04] : D.G. Eskin, Suyitno, L. Katgerman, (2004), Mechanical properties in the semi-solidstate and hot tearing of aluminium , *Progress in Materials Science*, **49**, pp.629.

[Fabregue04] : D. Fabregue, (2004), Microstructure et fissuration à chaud lors du soudage laser d'alliages d'aluminium 6000, thèse de doctorat, *Institut National Polytechnique de Grenoble*.

[Feurer77] : U. Feuerer, (1977), Influence of alloy composition and solidification conditionson dendrite arm spacing, feeding, and hot tear properties of aluminum alloys , *Proceedings of*

the international symposium on engineering alloys, , pp.131.

- [Fredriksson79] : H. Fredriksson, B. Lehtinen, (1979), Continuous observation of hot crack-formation during the deformation and heating in SEM , *Solidification and Casting of Metals*, , pp.260.
- [Heinrich03] : A. Heinrich, (2003), Modélisation thermomécanique de la coulée continue d'acier en deux dimensions, thèse de doctorat, *Mines-ParisTech*.
- [Hoyt01] : J. Hoyt, M. Asta, A. Karma, (2001), Method for Computing the Anisotropy of the solid-Liquid Interfacial free Energy , *Physical review Letters*, **86**, pp.5530.
- [Jaouen98] : O. Jaouen, (1998), Modélisation tridimensionnelle par éléments finis pour l'analyse thermomécanique du refroidissement des pièces coulées, thèse de doctorat, *Mines-ParisTech, CEMEF*.
- [Matsuda88] F. Matsuda, H. Nakagawa, T. Ueyama, Solidification crack susceptibility in laser beam weld metal of 0.2C- low alloy steels, *CISFEL*, sept 88
- [Nakagawa95] T. Nakagawa, T. Umeda, J. Murata, Y. Kaminura, N. Niwa, (1995), deformation behavior during solidification of steels, *ISIJ International* 1995, 35.
- [Pellini52] : W. Pellini, (1952), Strain theory of hot tearing , *Foundry*, **80**, pp.125.
- [Prokhorov62] : N. Prokhorov, (1962), , *Russian Castings Production*, **2**, pp.172.

- [Rappaz99] : M. Rappaz, J. Drezet, M. Gremaud, (1999), A new hot-tearing criterion , *Metallurgical and Material Transaction A*, **30A**, pp.449.
- [Vicente-Hernandez94] : P. Vicente-Hernandez, (1994), Vers une approche thermo-mécanique du procédé defonderie: caractérisation rhéologique et microstructurale d'alliages métalliques à l'état, thèse de doctorat, *Mines-ParisTech, CEMEF*.
- [Wintz94] : M. Wintz, M. Bobadilla, J. Jolivet, (1994), Fragilité à la solidification des acier : influence du carbone, du soufre et du phosphore , *La revue de Métallurgie-CIT*, pp105.
- [Won00] : Y. Won, T. Yeo, D. Seol, K. Oh, (2000), A new criterion for internal crackformation in continuously cast steels, *Metallurgical and Material Transaction B*, **31B**, pp.779.
- [Yamanaka90] : A. Yamanaka, K. Nakajima, K. Yasumoto, H. Kawashima, K. Nakai, (1990), Measurementof Critical Strain for SolidificationCracking , *Modelling of Casting, Welding, and Advanced Solidification Processes, Vol V*, M. Rappaz, M.R. Ozgu, and K.W.Mahin, Ed., (Davos, Switzerland), *TMS, Warrendale, PA*, , pp.279.

Chapitre 3 : Caractérisation mécanique par essais de traction à chauffage résistif

La détermination de l'état de contrainte et de déformation engendré par le refroidissement et la solidification d'une pièce de fonderie nécessite de connaître le comportement mécanique du matériau pour des températures comprises entre 900°C et la température de fusion.

Pour ces hautes températures il est nécessaire de prendre en compte les phénomènes liés à la viscosité du matériau et d'utiliser des lois de comportement de type élasto viscoplastique.

Au cours des différents paragraphes, nous présenterons succinctement les caractéristiques métallurgiques du matériau, le dispositif expérimental développé au CEMEF, ainsi que celui utilisé par Ascometal. Cette dernière étude nous permettra de montrer les limites des moyens conventionnels (extensomètre mécanique) pour la caractérisation mécanique à des températures supérieures à 1100°C.

Comme nous pourrions le voir l'utilisation d'une machine de traction avec chauffage par effet Joule (Gleeble ou Taboo) induit des gradients thermiques assez importants le long des éprouvettes. La zone centrale est la plus chaude tandis que les extrémités en contact avec les mors sont plutôt froides. Donc une bonne analyse des essais Taboo et Gleeble, passe automatiquement par une bonne connaissance des conditions thermiques sur une géométrie Taboo ou une géométrie Gleeble.

On s'intéresse à deux méthodes permettant de connaître un champ thermique. La première, expérimentale, utilise une caméra thermique, et comme nous le verrons dans ce chapitre, elle présente certaines difficultés du fait de l'évolution des propriétés radiatives en fonction de la température et de l'état de surface. L'autre méthode est numérique, elle présente l'avantage de pouvoir s'inscrire facilement dans une boucle d'optimisation.

Ce chapitre s'articulera en quatre parties, après une première partie introductive, une deuxième partie permettra de décrire le modèle numérique, la suivante faisant un point sur les paramètres connus et ceux à connaître, ainsi que sur les essais mis en oeuvre pour les identifier, et enfin l'application de ce modèle aux essais Taboo et Gleeble.

1. Caractérisation du comportement métallurgique des nuances retenues

1.1 Les nuances d'acier retenues

Dans le cadre du projet Cracracks, quatre nuances d'acier ont été sélectionnées. Il s'agit d'un acier à haute résistance, le DP780, d'un acier microallié ST52, d'un acier à outil 40CMD8 et d'un acier à roulement 100Cr6. On trouvera dans le tableau 1 les compositions chimiques résultant des analyses menées par ArcelorMittal, Ascometal et Industeel. Dans cette partie, sont explicitées les spécificités des différentes nuances.

La composition du ST52 le classe dans la famille des aciers microalliés. Les microalliés sont des aciers au carbone, manganèse, silicium dont on élève la limite d'élasticité et la résistance sans détériorer leur aptitude au soudage grâce à l'emploi d'éléments d'addition tels que le niobium, le vanadium ou le titane. Ces aciers sont utilisés pour fabriquer des tubes pour pipe-lines. Les aciers DP sont essentiellement utilisés pour des pièces de structure et de renfort car ils possèdent une forte capacité de consolidation et une excellente tenue à la fatigue. Les aciers Dual Phase (DP) sont composés de deux phases : (i) une phase ferritique, qui assure la ductilité du matériau, et (ii) une phase très dure (martensite ou bainite) qui implique la forte résistance à la déformation de ces matériaux. Quant au DP780 sa composition le classe dans la catégorie des aciers à haute résistance (UHS). Le 40CMD8 à une composition alliée au chrome, manganèse et molybdène qui lui confère des bonnes propriétés pour le travail à froid, lui offre une bonne trempabilité et une bonne résistance au choc.

Comme cela avait été défini dans le cadre du projet Cracracks, l'étude des nuances DP780 et ST52 incombe au CEMEF, tandis que Ascometal est en charge des deux autres nuances (40CMD8 et 100Cr6).

Les valeurs caractéristiques thermophysiques des deux nuances DP780 et ST52 proviennent de la base de données ArcelorMittal. Ces données seront utilisées pour la modélisation thermomécanique en coulée ou lors de l'essai de traction. Pour les deux autres nuances, 100Cr6 et 40CMD8, les données nous ont respectivement été fournies par Ascometal-Creas et par Industeel.

Grade	C	Si	Mn	Al	V	Ti	Nb	N	P	Mo	S	Cr	Ni	Cu
40CMD8	3630	2940	11450	-	1490	-	-	-	80	2170	4	18730	9410	1170
100Cr6	10100	2300	3300	110	-	-	200	-	210	-	260	15500	-	-
ST52Nb	1750	140	14600	320	60	151	130	40	-	-	-	-	-	-
DP780	1551	2237	18876	250	40	214	40	-	177	460	130	1802	-	-

table 1 : composition chimique en ppm des nuances du projet Cracracks

2. Dispositif expérimental utilisé pour la caractérisation mécanique

2.1 Présentation de la machine Taboo utilisée au CEMEF

Un dispositif a été développé au CEMEF afin de caractériser mécaniquement des aciers pour de larges gammes de températures représentatives des conditions thermiques rencontrées lors des procédés de fonderie ou de soudure (20°C à 1500°C). Les appareils de mesure ont dû être sélectionnés en conséquence.

La machine utilisée s'appelle Taboo, il s'agit d'une machine d'essai thermo-mécanique permettant d'étudier le comportement mécanique à haute température. Les sollicitations mécaniques sont mesurées à l'aide d'une cellule de force de 2,5kN adaptée à la mesure des efforts à haute température. L'incertitude de mesure est de 0,1%.

Le chauffage est réalisé par effet Joule en faisant passer un courant continu de 400A au maximum à travers l'éprouvette, ce qui, sur les géométries d'éprouvettes utilisées, peut représenter des vitesses de chauffage supérieures à 150°C/s. Le refroidissement peut être naturel, piloté par effet Joule dans le cas d'un refroidissement à l'air ou bien piloté par l'injection d'un gaz sur la surface de l'éprouvette. Les vitesses de refroidissement vont donc de 100 à quelques °C/s. La température est mesurée avec un thermocouple K, il s'agit de deux fils bornés de diamètre 200 µm soudés bout à bout par décharge capacitive sur la surface de l'éprouvette. Le pilotage des essais pour les sollicitations thermiques est géré par un PID, ce dernier délivre une consigne à l'alimentation et récupère ensuite la mesure thermocouple faisant office de boucle retour. Les paramètres PID (P:1, I:0.2 ,D:0) ont été déterminés afin d'atteindre des températures élevées pour une vitesse moyenne de chauffage de 20°C/s tout en conservant une bonne stabilité.

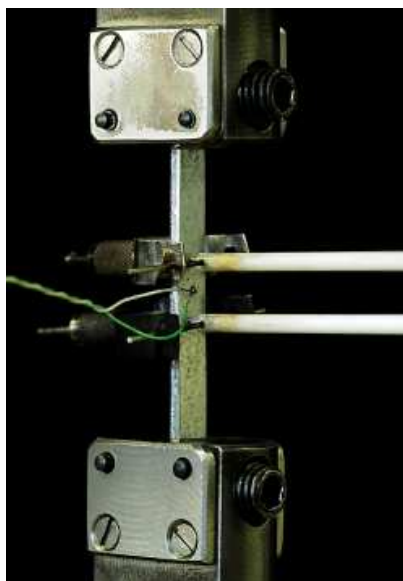


Figure 23 : vue du dispositif de mesures sur la machine Taboo : extensomètre mécanique et thermocouple soudé sur la surface de l'éprouvette.

Les chargements mécaniques de traction à force ou déplacement imposé(e) sont appliqués grâce à une colonne à vis, cette colonne est équipée d'un capteur LVDT qui permet d'en mesurer les déplacements.

Lors de l'essai mécanique, la déformation axiale peut être mesurée à l'aide d'un extensomètre mécanique. Il est constitué de deux tiges en alumine de manière à résister à des températures élevées. La température maximale autorisée est de 1100°C. Les pointes des tiges biseautés sont mises en contact avec la zone utile de 10mm, pour une course de +5mm/-2.5mm.

L'acquisition permet quant à elle d'enregistrer l'ensemble des mesures thermiques, mécaniques et électriques, c'est-à-dire, température, force, déplacement de la traverse, extensomètre, intensité et tension injectées. L'ensemble du montage est présenté à la Figure 24.

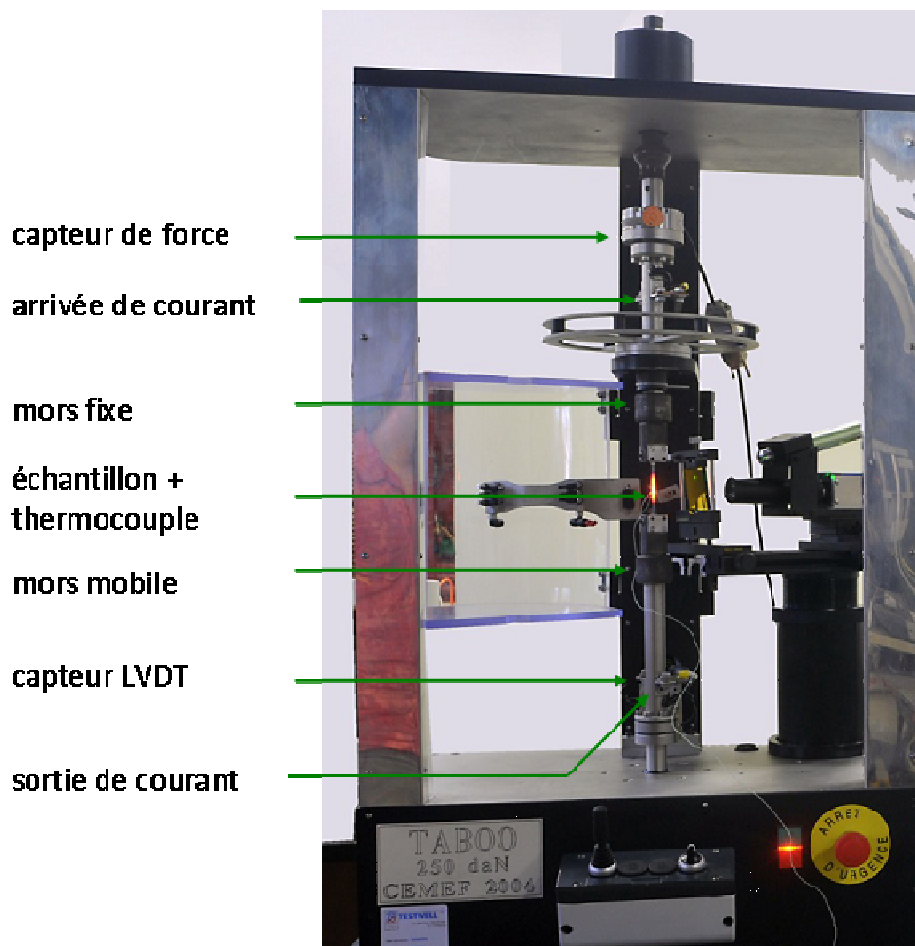


Figure 24 : vue de la machine de traction Taboo

A. La rigidité de la machine

On suppose dans un dépouillement idéal que le déplacement enregistré par le capteur LVDT de la machine, est égal au déplacement subi par l'échantillon. Or il n'en est rien, lors

d'un essai mécanique, les outils et l'ensemble de la colonne se déforment de manière élastique. La déformation élastique des pièces de la machine situées entre le point de mesure et l'extrémité de l'échantillon introduit donc un biais sur la mesure du déplacement réel des bords de l'échantillon. Cette déformation étant élastique on peut relier de manière directe et linéaire la variation de longueur des outils avec la force appliquée.

Pour caractériser cette rigidité machine, la technique la plus répandue consiste à réaliser un essai de traction sur un échantillon plus rigide que la machine. Ainsi on peut lire directement la relation reliant le déplacement à la force.

Le déplacement des extrémités de l'échantillon est ensuite calculé comme étant le déplacement mesuré de la traverse diminué du rapport entre la force mesurée et la rigidité machine. Sur Taboo une rigidité de 2850 N/mm a été mesurée.

La géométrie d'éprouvette classiquement utilisée sur la machine d'essai Taboo, est une éprouvette haltère plate comme celle présentée à la Figure 25.

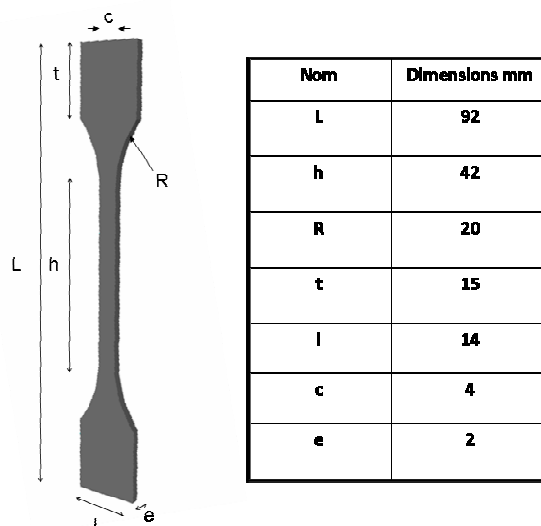


Figure 25: Géométrie des éprouvettes Taboo

2.2 Dispositif utilisé chez Ascometal

Les essais sur les nuances 100Cr6 et 40CMD8 sont menés sur un simulateur thermo-mécanique Gleeble 3800 de la société DSI installé chez Ascometal Creas (Figure 26). Gleeble est une presse hydraulique capable d'exercer 100kN en traction ou compression. Cette machine est capable d'atteindre des grandes vitesses de sollicitation de l'ordre de quelques centaines de millimètres par seconde. L'éprouvette est fixée entre deux mors refroidis par circulation d'eau. Elle est chauffée par effet Joule sous courant alternatif, ce qui permet des vitesses de chauffage très élevées ainsi qu'une bonne homogénéité radiale de la température dans l'éprouvette. Le contrôle de la Gleeble se fait via un ordinateur, ce dernier est aussi utilisé pour l'enregistrement des résultats.

La géométrie de l'éprouvette est cylindrique, elle a été optimisée à l'aide d'une simulation couplée electro-thermique. Un thermocouple de type K forme de deux fils de diamètre 0.2 mm est soudé au milieu de la partie calibrée de l'éprouvette. Ce thermocouple permet le pilotage du simulateur et la mesure de la température d'essai. L'essai est réalisé dans une enceinte permettant soit de réaliser un vide primaire soit de réaliser des balayages avec des gaz inertes.

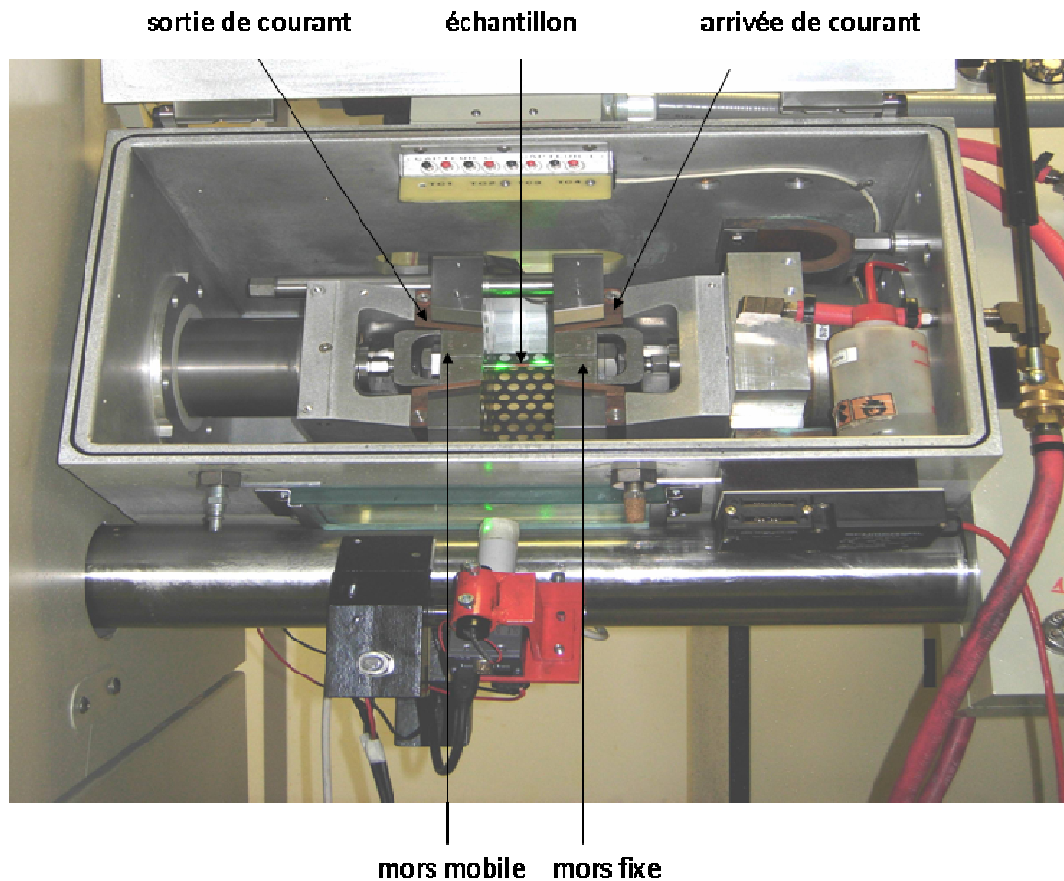


Figure 26 : vue de la machine de traction/compression Gleeble

A la différence des géométries d'éprouvettes utilisées sur Taboo qui sont plates, celles utilisées sur Gleeble sont axisymétriques ; Un exemple est présenté à la Figure 27

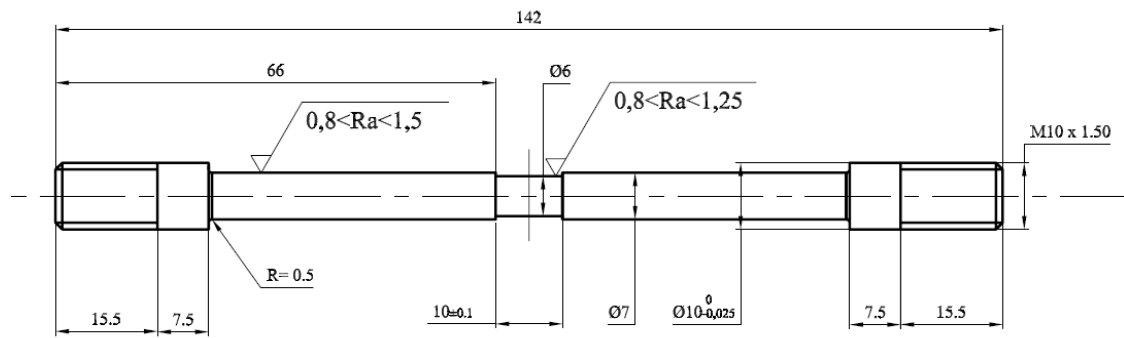


Figure 27: Géométrie de l'éprouvette Gleeble utilisée pour les tests

3. Description de la formulation

Le modèle numérique sur lequel nous nous sommes basés dérive d'une part de travaux portant sur la modélisation numérique du chauffage par induction [Favennec03] et d'autre part de travaux sur la modélisation du procédé de soudage par effet Joule [Arbaoui07]. Ces travaux avaient été réalisés sur la base du logiciel Forge, qui a également été choisi comme cadre de nos développements.

Le modèle couplé qui a été mis en place fait intervenir un modèle thermomécanique couplé à un modèle électrique. De ce fait, il est nécessaire de prendre en compte l'ensemble des phénomènes multi physiques pouvant intervenir lors des essais Taboo et Gleeble. De plus, afin de contrôler la température, une régulation en PID du courant a été ajoutée.

3.1 Le problème thermo-électrique

Avant de décrire plus précisément la résolution électrique-thermique-mécanique sur laquelle est basée l'ensemble de la simulation et l'analyse inverse, nous présentons un schéma nous permettant d'introduire le vocabulaire utilisé dans le reste du chapitre (Figure 28). On considère un conducteur ohmique (échantillon) sur lequel une densité de courant est imposée à une extrémité via une cathode. À l'autre extrémité, sur l'anode, un potentiel électrique nul est imposé. Le matériau est donc parcouru par un courant électrique (J).

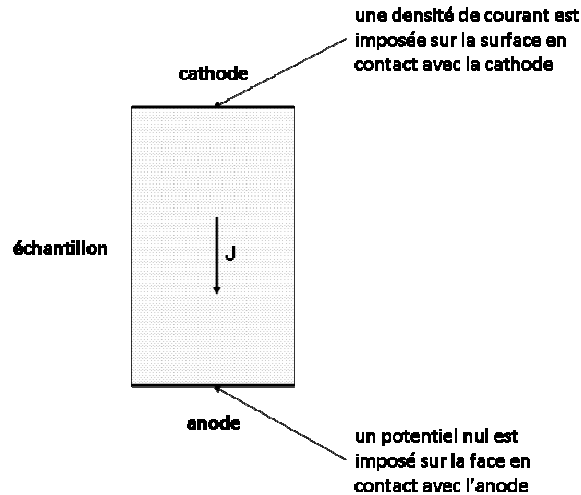


Figure 28: représentation schématique de la géométrie

A partir de la géométrie présentée ci-dessus, nous pouvons écrire les équations régissant un problème couplé électrique-thermique. La résistivité électrique est supposée dépendre de la seule température. Ainsi à température ambiante, la résistivité électrique est uniformément constante dans tout le matériau. Une fois appliqué un courant électrique, celui-ci génère une source de chaleur à travers le conducteur. En conséquence, le problème électrique thermique ainsi décrit est un problème fortement couplé. Le modèle présenté ci-dessus se base sur l'équation de conservation de la charge $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$ où \mathbf{J} représente le vecteur densité de courant. Plus précisément en appliquant le théorème de Gauss et la loi d'Ohm, on peut écrire que :

$$\mathbf{J} = \sigma_e \mathbf{E} = -\sigma_e \nabla U, \quad (29)$$

où σ_e est définie comme la conductivité électrique du matériau. Le champ électrique qui en résulte s'écrit $\mathbf{E} = \nabla U$, où U est le potentiel électrique. Par conséquent, si on applique le principe de conservation de la charge à l'équation (29), celle-ci s'écrit :

$$\nabla \cdot (\sigma_e \nabla U) = 0. \quad (30)$$

Le potentiel électrique est donc solution d'un laplacien. Il dépend des conditions aux limites, et notamment des valeurs imposées sur les extrémités. A l'intérieur du conducteur apparaissent des surfaces équipotentiels et un réseau de lignes de courant qui sont orthogonales au réseau d'équipotentiels. Ainsi l'échauffement provoqué par effet Joule est directement relié à l'équation précédente. La puissance volumique correspondante s'écrit:

$$q_e = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E} = \sigma_e \|\nabla U\|^2. \quad (31)$$

Sous l'effet de cette puissance volumique, le matériau traversé par un champ électrique \mathbf{E} va subir un échauffement. Soit Ω le domaine occupé par ce matériau. La distribution du courant et de la température dans Ω est gouvernée par les équations aux dérivées partielles suivantes:

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\sigma_e \nabla U) = 0 \\ \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \sigma_e \|\nabla U\|^2 + \nabla \cdot (k \nabla T) \end{cases} \quad (32)$$

dans l'équation (32) les effets dus à l'advection sont ignorés. ρ est la densité du matériau, k la conductivité thermique et C_p la chaleur spécifique. Dans le calcul numérique ρ et C_p sont considérées comme thermo-dépendantes ainsi que k et σ_e qui sont supposées de plus isotropes. Enfin, des termes de conditions aux limites peuvent être ajoutés à cette équation. Ces termes sont décrits dans le paragraphe suivant.

3.2 Conditions aux limites et conditions interfaciales

Nous verrons que les conditions aux limites sont assez simples à exprimer. Par contre les conditions aux interfaces sont plus complexes à mettre en place, et nécessitent un plus grand développement.

Pour prendre au mieux en compte les effets de micro constriction de surface, nous introduirons les notions de résistances électriques et thermiques de contact. Ces paramètres dépendent principalement de la température de l'interface. Cette température peut dépendre des températures des corps en contact ainsi que d'un coefficient de partage de la puissance dissipée par effet Joule aux interfaces. Des études récentes ont été réalisées sur ces thèmes [Sibilia 04][Feulvarch 06].

A. conditions aux limites

Les conditions aux limites électriques comprennent tous les échanges entre l'air et la surface de l'échantillon où le flux électrique est nul, dans ce cas $\sigma_e \nabla U = 0$. Pour l'échange entre les échantillons et les mors, une condition de Neumann est imposée sur la surface qui est en contact avec la cathode. De plus, une condition de Dirichlet est imposée de l'autre côté, sur la surface en contact avec l'anode. Ces conditions peuvent être exprimées comme suit:

$$\begin{cases} \sigma_e \nabla U \cdot \mathbf{n} = -\mathbf{J} \cdot \mathbf{n} = J_{imp} & \text{sur cathode} \\ U = 0 & \text{sur anode} \end{cases} \quad (33)$$

où \mathbf{n} est le vecteur normal unitaire extérieur. La première condition limite correspond à l'application d'une densité de courant électrique J_{imp} . La valeur de J_{imp} peut être automatiquement réglée par une boucle de régulation en PID, comme cela est expliqué au paragraphe 8.

a) La convection

Il s'agit d'un phénomène macroscopique de transfert de chaleur par transport dans un fluide en mouvement ou dans un solide (ou l'on parle de conduction). La convection est due à l'action simultanée des différences de température qui existent dans le milieu et d'un champ de forces massiques.

$$-k \nabla T \cdot \mathbf{n} = h_c (T - T_{ext}), \quad (34)$$

où T_{ext} est la température milieu environnant, h_c est le coefficient convection entre les pièces et le milieu environnant.

b) Convection- Rayonnement thermique

Le rayonnement thermique est un échange d'énergie par ondes électromagnétiques émises par la matière sur des longueurs d'ondes étendues (des UV à l'IR). Le rayonnement thermique d'une surface est décrit par la loi de Stefan-Boltzmann. Celui –ci est généralement couplé à un phénomène de convection :

$$-k\nabla T \cdot \mathbf{n} = h_c(T - T_{ext}) + \varepsilon_r \sigma_B(T^4 - T_{ext}^4) \quad (35)$$

où $\sigma_B = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-4}$ est la constante de Stefan-Boltzmann, ε_r l'émissivité, T la température sur la surface libre et T_{ext} la température ambiante.

B. conditions aux interfaces

Considérant une géométrie plus complexe, comprenant deux ou plusieurs échantillons (Figure 29), une condition limite peut être ajoutée afin de définir le contact entre les différents domaines de calcul.

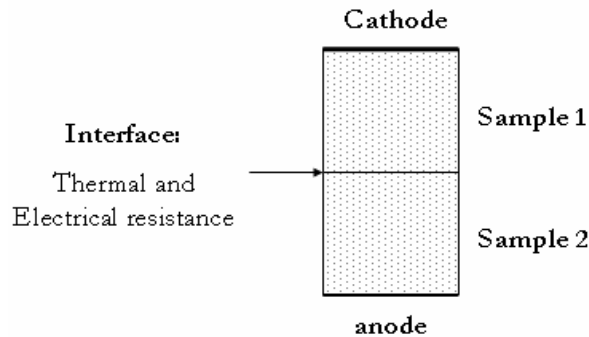


Figure 29: schéma de principe d'un empilement de deux échantillons, avec mise en évidence des résistances électriques et thermiques de contact.

Dans ce cas, une résistance électrique et une résistance thermique de contact sont prises en compte entre les deux parties. En effet, lorsque deux surfaces possédant une certaine rugosité sont mises en contact, la zone effective de contact est beaucoup plus petite que la zone de contact apparente. Ainsi le courant appliqué et le flux de chaleur vont traverser l'interface uniquement à travers cette zone de contact effective. Il est à noter pour ce qui concerne le problème électrique que cette constriction produit une augmentation locale de la densité de courant, qui produit un chauffage local par effet Joule. Ce phénomène est particulièrement exploité dans l'ensemble des procédés d'assemblage faisant intervenir des courants électriques (soudage UW, soudage en bout, soudage par point...)

Notons U_i et T_i respectivement les potentiels et températures des corps en contact Ω_i . Soient φ_{elect} et φ_{ther} respectivement le flux dû à la densité de courant $\|\mathbf{J}\| = \varphi_{elect}$ et la densité de flux chaleur.

En supposant que l'interface ne présente aucune inertie thermique, la densité de flux de chaleur échangée peut s'écrire à l'interface entre Ω_1 et Ω_2 :

$$\varphi_{ther} = h_{therm} (T_1 - T_2) . \quad (36)$$

où $h_{therm} = \frac{1}{R_{Therm_contact}}$ est le coefficient de transfert de chaleur supposé constant, T_1 et T_2 sont respectivement les températures de surface des deux échantillons 1 et 2.

De même, la densité de courant peut être exprimée en fonction de la résistance électrique contact $R_{elect_contact}$:

$$\varphi_{elect} = \frac{1}{R_{elect_contact}} (U_1 - U_2) , \quad (37)$$

De la même façon que dans l'équation (31), la totalité de la puissance dissipée par effet Joule à l'interface peut être exprimée à partir de l'équation précédente et s'écrire :

$$\frac{1}{R_{elect_contact}} (U_1 - U_2)^2 . \quad (38)$$

Cette expression est une puissance qui est produite à l'interface, et est exprimée par unité de surface ; cette dernière va provoquer l'échauffement à l'interface décrit par (38). Ainsi une partie va être dirigée vers le corps 1 tandis que l'autre va être dirigée vers le corps 2. Donc on suppose que le corps 1 reçoit une fraction λ de cette puissance dissipée, alors que le corps 2 reçoit une fraction $1 - \lambda$ de cette puissance. Par conséquent, sur chaque corps, on peut écrire que :

$$\begin{aligned} -k_1 \nabla T \cdot \mathbf{n}_1 &= \frac{\lambda}{R_{elect_contact}} (U_1 - U_2)^2 + \frac{1}{R_{Therm_contact}} (T_1 - T_2) \text{ sur le corps 1} \\ -k_2 \nabla T \cdot \mathbf{n}_2 &= \frac{1 - \lambda}{R_{elect_contact}} (U_1 - U_2)^2 + \frac{1}{R_{Therm_contact}} (T_2 - T_1) \text{ sur le corps 2} \end{aligned} \quad (39)$$

La fraction λ sera basée sur les valeurs d'effusivité des corps 1 et 2.

4. Problème mécanique

On supposera tout au long de ce paragraphe que la température à un incrément de temps i est connue en chaque point de calcul. Donc l'intégration du comportement mécanique à chaque incrément se fera à température constante. La température pourra

évoluer d'un incrément à l'autre. Une description plus complète de la mécanique pour le logiciel Forge peut être trouvée dans [Aliaga 00].

Le problème mécanique est régi par l'équation de conservation de la quantité de mouvement, qui peut être exprimée si on néglige les forces d'inertie, par:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad (40)$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur des contraintes de Cauchy, et \mathbf{f} est la densité de forces externes par unité de masse (ici la gravité). En dessous de la température du solidus, on considère un modèle thermo-élastique visco-plastique, dans lequel le tenseur vitesse de déformation peut être décomposé comme suit:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{th}, \quad (41)$$

où $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp}, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{th}$ sont respectivement la partie élastique, la partie visco-plastique et la partie thermique du tenseur vitesse de déformation. On considère ici le modèle dit unifié à la différence du modèle composé de deux types de déformation inélastique [Delobelle 84]. Dans ce modèle dit unifié, on ne considère pas de déformation plastique instantanée. Mais on introduit deux échelles de temps dans l'écrouissage, une partie de l'écrouissage étant due à la plasticité, l'autre étant due à la viscosité. L'avantage d'un tel modèle est la possible transition d'un modèle plastique à basse température à un modèle viscoplastique à haute température. Pour Chaboche [Chaboche89], ce modèle est le plus adapté à la prise en compte des phénomènes thermodépendants.

La partie élastique est définie par la loi de Hooke et la partie thermique est directement proportionnelle à la température. La vitesse de déformation viscoplastique est quant à elle, liée au déviateur des contraintes de von Mises. L'ensemble des lois de comportement régissant un comportement thermo élastique viscoplastique peut s'écrire, dans le cadre de petites déformations bien adapté à notre étude:

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e &= \frac{1+\nu}{E} \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \frac{\nu}{E} tr(\dot{\boldsymbol{\sigma}}) \mathbf{Id} \\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{th} &= \alpha \dot{T} \mathbf{Id} \\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} &= \frac{3\dot{\bar{\varepsilon}}}{2\bar{\sigma}} \mathbf{s} \end{aligned} \quad (42)$$

Ici, ν et E sont respectivement le coefficient de Poisson et le module de Young. \mathbf{Id} désigne le tenseur identité. Dans le terme viscoplastique, \mathbf{s} est la partie déviatorique du tenseur des contraintes :

$$\mathbf{s} = \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3} tr(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{Id} \quad (43)$$

Le taux de déformation équivalent de von Mises $\dot{\bar{\varepsilon}}$ et la contrainte équivalente $\bar{\sigma}$ sont respectivement définis par:

$$\dot{\bar{\epsilon}} = \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\epsilon}_{ij}^{vp} \dot{\epsilon}_{ij}^{vp}} \quad \text{et} \quad \bar{\sigma} = \sqrt{\frac{3}{2} \mathbf{s}_{ij} \mathbf{s}_{ij}} \quad (44)$$

En utilisant un critère de plasticité, le domaine élastique est défini par:

$$f(\sigma) = \bar{\sigma} - \sigma_y - R < 0 \quad (45)$$

Et on aura donc un écoulement élasto-viscoplastique pour $f(\sigma) \geq 0$. Dans l'équation précédente, σ_y indique la limite d'élasticité initiale et R représente une fonction d'écrouissage.

Différentes expressions peuvent être introduites pour décrire la relation entre le taux de déformation de von Mises et la contrainte équivalente. La première formulation est dite de forme multiplicative ; l'écrouissage et la sensibilité à la déformation sont pris en compte dans une formulation multiplicative telle que:

$$\bar{\sigma} = \sigma_y + K \bar{\epsilon}^n \dot{\bar{\epsilon}}^m \quad (46)$$

$$\dot{\bar{\epsilon}}^{vp} = \frac{3}{2\bar{\sigma}} \left\langle \frac{f(\sigma)}{K \bar{\epsilon}^n} \right\rangle^{1/m} \mathbf{s} \quad \text{avec} \quad \langle f \rangle = \max(0, f) \quad (47)$$

Lorsque $R = 0$.

Une autre formulation peut être considérée, dans laquelle l'augmentation de la contrainte d'écoulement due à l'écrouissage et la sensibilité au taux de déformation sont pris en compte dans une formulation additive. Dans ce cas, la contrainte d'écoulement s'exprime ainsi :

$$\bar{\sigma} = \sigma_y + R + K \dot{\bar{\epsilon}}^m \quad (48)$$

avec $R = H \bar{\epsilon}^n$. On obtient alors:

$$\dot{\bar{\epsilon}}^{vp} = \frac{3}{2\bar{\sigma}} \left\langle \frac{f(\sigma)}{K} \right\rangle^{1/m} \mathbf{s} \quad \text{avec} \quad \langle f \rangle = \max(0, f) \quad (49)$$

Enfin, il conviendra d'ajouter des conditions aux limites mécaniques qui peuvent être exprimées en contraintes ou en vitesse.

Dans nos simulations, des conditions aux limites en vitesse seront appliquées sur les bords de l'éprouvette, au moyen d'un outil rigide en contact bilatéral collant.

5. Résolution numérique du problème couplé

5.1 Formulation intégrale du problème électrique thermique

Afin d'établir les formulations faibles des équations (32), nous les multiplions, respectivement, par les fonctions test φ et ψ appartenant aux espaces fonctionnels V et W :

$$\begin{aligned} V &= \left\{ \varphi \in H^1(\Omega); \varphi = 0 \text{ on } \partial\Omega_{anode} \right\} \\ W &= \left\{ \psi \in H^1(\Omega) \right\} \end{aligned} \quad (50)$$

avec $H^1(\Omega) = \left\{ \varphi, \psi \in L^2(\Omega), \nabla \varphi, \nabla \psi \in L^2(\Omega) \right\}$. Après les avoir intégrées sur l'ensemble du domaine Ω , et avoir utilisé le théorème de Green, ces équations deviennent:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \sigma_e \nabla U \cdot \nabla \varphi d\Omega + \int_{\partial\Omega_{contact}} \frac{1}{R_{elect_contact}} (U_1 - U_2) \varphi dS &= \int_{\partial\Omega_{cathode}} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \varphi dS \\ \int_{\Omega} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} \psi d\Omega + \int_{\Omega} k \nabla T \cdot \nabla \psi d\Omega + \int_{d\Omega} h_c T \psi dS - \int_{d\Omega} h_c T_{ext} \psi dS & \\ + \int_{\partial\Omega} \frac{1}{R_{elect_contact}} (U_1 - U_2)^2 \psi dS &= \int_{\Omega} \sigma_e \|\nabla U\|^2 \psi d\Omega \end{aligned} \quad (51)$$

La condition aux limites de rayonnement peut être linéarisée par rapport à la température $\varepsilon_r \sigma_B (T^4 - T_{ext}^4) = \varepsilon_r \sigma_B (T^{*2} + T_{ext}^2)(T^* + T_{ext})(T^* - T_{ext})$, où T^* est une approximation de la température (la température à l'incrément de temps précédent).

5.2 Formulation intégrale du problème mécanique

Le problème mécanique est résolu en utilisant une formulation mixte en vitesse et pression en tant que variables primitives. Ces variables sont interpolées à l'aide des éléments finis mixtes P1 + / P1. Pour résoudre le problème mécanique, le principe de la puissance virtuelle est utilisé. Ainsi, les équations d'équilibre et d'incompressibilité de la déformation plastique sont exprimées selon les formes faibles décrites ci-dessous. La première forme faible qui représente l'équation d'équilibre est formulée à partir du tenseur de contrainte déviatorique \mathbf{s} . Par conséquent, la seconde équation exprime l'incompressibilité de la déformation plastique. Ainsi, le système d'équations s'écrit comme suit:

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v}^* : \mathbf{s} : \dot{\mathbf{e}}^* d\Omega - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{v}^* d\Omega - \int_{\partial\Omega} \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}^* dS - \int_{\Omega} \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v}^* d\Omega = 0 \\ \int_{\Omega} p^* \text{tr } \dot{\mathbf{e}}^{vp} d\Omega = 0 \end{cases} \quad (52)$$

où \mathbf{v}^* et p^* sont respectivement des fonctions tests vectorielles et scalaires qui peuvent être considérées comme une vitesse et une pression virtuelles.

5.3 Choix d'un élément

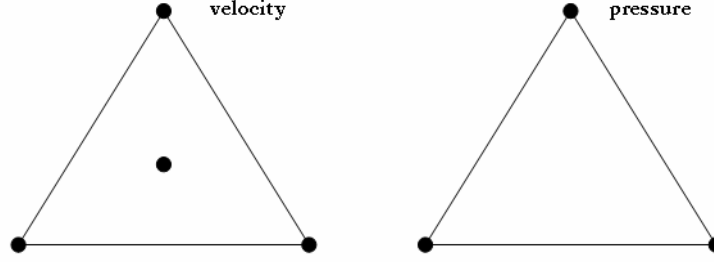


Figure 30: représentation de l'élément P1 + / P1 en 2D

Nous utilisons ici des éléments P1 + / P1 [Fortin85] [Perchat00]. Ces éléments sont linéaires triangulaires (en 2D). "+" Signifie que nous utilisons un degré de liberté supplémentaire pour l'interpolation de vitesse, au centre de l'élément. Ce degré de liberté supplémentaire permet de se conformer à la relation de compatibilité Brezzi-Babuska entre les espaces de discrétisation pour la vitesse et la pression. L'interpolation associée est de type « bulle ». La vitesse est linéaire et continue, mais elle possède un degré de liberté supplémentaire. Le champ de pression est linéaire et continu sur les éléments (voir la Figure 30).

5.4 Discrétisation spatiale:

Les formulations faibles (51) doivent maintenant être discrétisées dans l'espace. Nous ne considérerons ici que la discrétisation spatiale pour le problème électrique-thermique. La discrétisation spatiale du problème mécanique peut être trouvée, par exemple, dans la thèse de K. Mocellin [Mocellin99]. Les espaces fonctionnels V et W sont classiquement approchés par, respectivement, l'espace discrétisé V^h et W^h . Les fonctions tests φ et ψ sont approchées par φ^h et ψ^h et les inconnues U et T par U^h and T^h . Le choix d'une base adéquate de l'espace discrétisé est fournie par la forme de fonctions N_i associées à chaque nœud i du maillage triangulaire linéaire. Un système d'équation est alors obtenu pour résoudre numériquement l'équation (42) :

$$\begin{cases} \mathbf{K}\mathbf{U} = \mathbf{Q} \\ \mathbf{C} \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + \mathbf{R}\mathbf{T} = \mathbf{P} \end{cases}, \quad (53)$$

Dans la première équation, \mathbf{K} est la matrice de conductivité électrique. \mathbf{U} est le vecteur solution des potentiels électriques nodaux sur le domaine discrétisé et \mathbf{Q} est le membre de droite dans l'équation. Dans la deuxième équation, \mathbf{C} est la matrice de capacité thermique, \mathbf{R} est la matrice de conductivité thermique. \mathbf{T} est le vecteur solution des températures nodales sur le domaine considéré discrétisé et \mathbf{P} est le second membre.

Le potentiel électrique et la température sont interpolés, respectivement à partir des valeurs du potentiel et de la température en chaque nœud, et peuvent être exprimés comme suit:

$$\begin{aligned} U &= \sum_{i=1}^{\text{number of points}} U_i^h N_i^h \\ T &= \sum_{i=1}^{\text{number of points}} T_i^h N_i^h \end{aligned} \quad (54)$$

Pour le problème électrique, la matrice de conductivité \mathbf{K} résulte d'un processus d'assemblage des contributions par élément. La contribution de chaque élément fini e à cette matrice a l'expression suivante:

$$K_i^e = \int_{\partial\Omega_{elt} \cap \partial\Omega_{cathode}} \sigma_e \nabla N_i \cdot \nabla N_j dS + \int_{\partial\Omega_{elt} \cap \partial\Omega_{contact}} \frac{1}{R_{elect_contact}} N_i N_j dS, \quad (55)$$

La contribution au second membre est définie par:

$$Q_i^e = \int_{\partial\Omega_{elt} \cap \partial\Omega_{cathode}} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} N_i dS + \int_{\partial\Omega_{elt} \cap \partial\Omega_{contact}} \frac{1}{R_{elect_contact}} U_2 N_i dS, \quad (56)$$

De même, pour le problème thermique, les contributions des différents éléments peuvent être définies comme suit:

$$\begin{aligned} C_{ij}^e &= \int_{\Omega_{elt}} \rho c_p N_i N_j d\Omega \\ R_{ij}^e &= \int_{\Omega_{elt}} k \nabla N_i \cdot \nabla N_j d\Omega + \int_{\partial\Omega_{elt} \cap \partial\Omega_{surface}} h N_i N_j dS, \\ P_i^e &= \int_{\Omega_{elt}} \sigma_e \|\nabla U\|^2 N_i d\Omega + \int_{\partial\Omega_{elt} \cap \partial\Omega_{surface}} h T_{ext} N_i dS + \int_{\partial\Omega_{elt} \cap \partial\Omega_{surface}} h T_{ext} N_i dS \end{aligned} \quad (57)$$

La condition aux limites de résistance électrique de contact entre deux pièces est réalisée par une technique de type maître / esclave [Chenot02].

6. Mesures des paramètres nécessaires à la simulation

En fait, comme nous avons pu le voir, de nombreux paramètres matériaux sont nécessaires pour réaliser des simulations numériques. Voyons très rapidement quels sont les paramètres en notre possession et quels sont ceux à identifier. En fait l'ensemble des données thermophysiques est connu; elles nous ont été fournies par les différents partenaires industriels du projet. Un résumé de ces données est fourni en annexe. Par contre sont manquantes, l'ensemble des données électriques, ainsi que les conditions aux limites thermiques (échanges thermiques et émissivité).

Nous présenterons dans ce paragraphe les moyens mis en place pour obtenir ces données et les résultats obtenus

6.1 Mesure de résistivité électrique

Dans l'équation (32), la conductivité électrique est l'un des paramètres les plus importants. La valeur de la résistivité électrique est issue de la mesure de la résistance électrique sur des échantillons. Nous verrons dans le prochain paragraphe une méthode de mesure de la résistivité, mais d'abord voyons quelles expressions permettent de relier la conductivité aux différents observables pouvant être enregistrés lors d'un essai. L'équation qui relie les deux valeurs peut être exprimée comme suit. En partant du théorème de Gauss et de la loi d'Ohm nous pouvons écrire :

$$\|\mathbf{J}\| = \sigma_e \|\nabla U\|, \quad (58)$$

Pour un échantillon tel qu'il est représenté Figure 31, on pose que $\nabla U = \Delta U / \Delta L$, où ΔL est la distance sur laquelle on mesure la résistance. La loi d'Ohm permet de définir la résistance R d'un conducteur selon :

$$\Delta U = RI \text{ et } \|\mathbf{J}\| = \frac{I}{S} \quad (59)$$

où S est la section de l'échantillon, I est le courant et ΔU la différence de potentiel aux extrémités du conducteur. Il est possible, à partir des équations (58) et (59), de trouver la relation liant la résistance électrique à la résistivité électrique :

$$R = \rho_e \frac{L}{S} \text{ où la résistivité électrique est } \rho_e = \frac{1}{\sigma_e} \quad (60)$$

Donc, en mesurant la résistance sur un échantillon, il est possible de connaître la conductivité ou la résistivité électrique.

A. Procédures expérimentales:

La mesure de la résistivité électrique est une mesure mature, souvent pratiquée pour les problématiques de soudage [Song05]. La méthode de mesure à quatre points est l'une des plus communes pour l'analyse expérimentale des échantillons conducteurs [Hajek 07]. Plusieurs campagnes de mesures expérimentales basées sur cette méthode en quatre points ont été effectuées, les détails expérimentaux et la procédure sont présentés dans la suite du paragraphe. Afin d'étudier l'influence de la température sur la résistance électrique, une méthode statique est utilisée pour les mesures.

a) Méthode « quatre points »:

Lorsque l'on souhaite mesurer des valeurs très faibles de résistances ohmiques, dans la gamme milli ou du micro Ohm, la méthode de mesure classique à deux points n'est pas satisfaisante car la résistance des fils de mesure induit une erreur importante. La méthode quatre points est alors généralement préférée. Elle diffère d'une mesure deux points par la présence de deux fils distincts des deux fils qui apporte le courant. Ces fils supplémentaires

sont utilisés pour la mesure du potentiel. En effet dans une mesure de type deux points, les même fils servent à l'injection d'un courant et à la mesure de la différence de potentiel. La Figure 31 présentée ici offre une vue schématique d'une mesure quatre points.

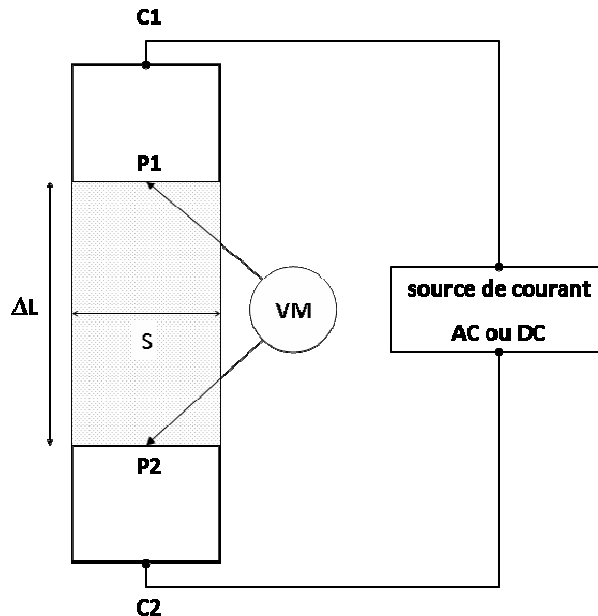


Figure 31: schéma de principe d'un montage quatre points.

Sur cette figure, on note la présence de deux fils conducteurs de courant notés $C1$ et $C2$. Ces deux fils font circuler le courant à travers l'échantillon à tester. Les deux fils $P1$ et $P2$ permettent une mesure de tension aux bornes de l'échantillon. La valeur de la résistance R est obtenue en utilisant la loi d'Ohm, ce qui permet de calculer σ_e connaissant L et S . Lors des essais deux fils de platine sont soudés par décharge capacitive sur la surface de l'échantillon. Les fils de platine ont été préférés aux fils classiques de thermocouple (type K) ou à des classiques fils de cuivre. A la différence des fils de thermocouple, les fils de platine ne se dégradent pas à haute température, tout en gardant des bonnes propriétés de soudabilité sur les éprouvettes, à la différence des fils de cuivre.

Du fait que la résistivité des matériaux est thermo-dépendante la précision de la mesure de la température est cruciale dans les expériences. La température est mesurée en utilisant des fils de thermocouple (Chrome-alumel ou de type K) qui sont soudés sur la partie centrale de l'échantillon.

b) Echantillons :

Les mesures sont effectuées sur des matériaux différents ; cependant pour que les mesures soient reproductibles, une même forme d'éprouvette est utilisée pour tous les essais. En fait, comme le montre l'équation (60), la résistivité électrique découle directement de la valeur de la résistance, cette dernière pouvant être mesurée directement lors des essais via le montage décrit ci-dessus. Néanmoins, la résistivité (et par conséquent la valeur de la résistance) étant thermodépendante, la mesure correcte va être affectée par la

température, mais aussi par le gradient thermique et par le choix de la zone de mesure. C'est pour ces raisons qu'une géométrie d'éprouvette particulière a été choisie pour réaliser ces mesures.

Les ordres de grandeur de résistivité électrique des aciers étant assez faibles, comme le montre l'équation (60) la mesure de résistance doit se faire sur une zone la plus étendue possible. La résistivité étant thermodépendante, cette zone doit présenter une bonne homogénéité en température. Connaissant ces contraintes, le choix de la meilleure géométrie a été optimisée par simulation numérique.

- D'une part en partant du constat expérimental que les échantillons de faible section présentent un gradient thermique axial plus faible. Ce constat est validé par la simulation numérique d'un essai de chauffage à 1200°C avec une conductivité électrique supposée constante. La Figure 32 compare le gradient thermique simulé pour deux types d'éprouvettes, une classiquement utilisée lors des essais (Figure 51) et une éprouvette parallélépipédique de type « bûchette » (ou éprouvette de gradient). On note que la zone où la température est constante est bien plus étendue sur l'éprouvette de résistivité (optimisée de type « bûchette ») que sur l'éprouvette classique (utilisée pour les essais mécaniques).
- De plus, à partir de l'équation (60), on note que pour une résistivité donnée, la résistance mesurée sera d'autant plus grande que la section sera faible et que la zone de mesure sera étendue. Minimiser la section pourrait augmenter l'incertitude de mesure. En effet, si on considère que l'incertitude sur la conductivité est toujours la même, on peut écrire :

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{\Delta L}{L} + \frac{\Delta S}{S}, \quad (61)$$

Dans notre cas, on peut calculer l'incertitude sur chacune des deux géométries. On considère que pour les deux géométries les incertitudes sur la longueur et sur la section sont les mêmes. On les prend respectivement égales à 0.2mm et 0.05mm. On obtient donc $\frac{\Delta R}{R} = \frac{0,2}{4} + \frac{0,05}{4} = 0,0625$ pour l'éprouvette classique, et $\frac{\Delta R}{R} = \frac{0,2}{10} + \frac{0,05}{2} = 0,045$ pour l'éprouvette « bûchette ».

La géométrie retenue est celle présentée Figure 32 ; les échantillons sont de forme parallélépipédique, de petite section (92 x 2 x 2mm). La mesure de tension se fait aux bornes d'une zone utile située à 5 mm de part et d'autre du centre de l'éprouvette. Les fils de platine utilisés sont soudés sur l'éprouvette. Cette zone est ainsi définie, car la température y est supposée homogène.

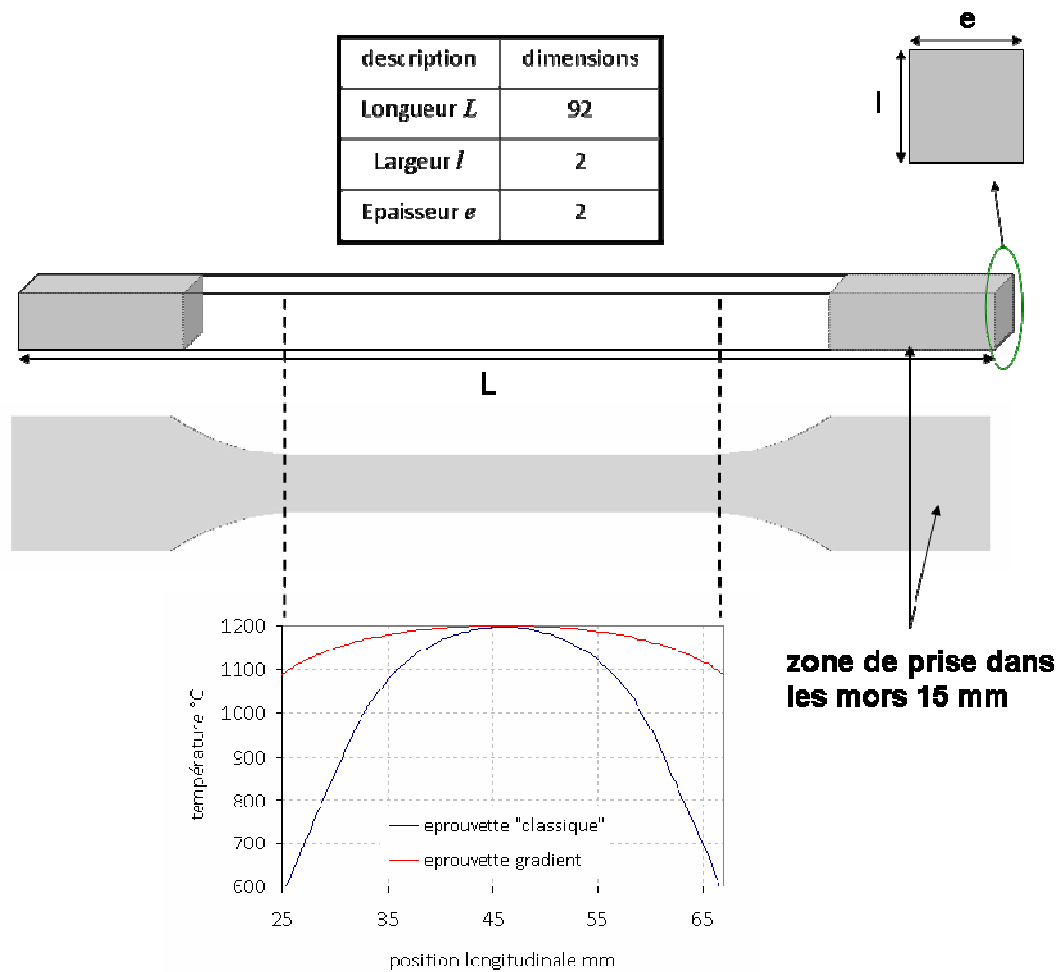


Figure 32: a) schéma de l'éprouvette b) comparaison du gradient thermique longitudinal le long d'une éprouvette classique de traction (les dimensions sont données sur la Figure 25), et le long de l'éprouvette optimisée pour la mesure de résistivité. Ces valeurs de température sont obtenues par simulation numérique.

c) Expériences:

Au cours de chaque expérience, les paramètres suivants sont enregistrés, la force, le déplacement des mors, la température de chauffage, l'intensité du courant et la tension dans la zone de mesure. Du fait qu'on utilise une méthode quatre points, l'intensité considérée est celle délivrée par l'unité de puissance, quant à la tension une acquisition est faite avec une fréquence de 50Hz via les deux fils soudés et reliés à un boîtier National Instrument

Une vitesse de chauffage constante est imposée sur le spécimen, celle-ci permet de porter la température à 1200°C avec un taux de chauffage de 20°C/s. Au cours de cette étape de chauffage, le déplacement des mors est régulé par une méthode de PID pour maintenir la force aussi proche que possible de zéro.

d) Coefficient de dilatation :

La température de l'éprouvette, au cours de cette expérience, pouvant atteindre 1200°C, il convient de prendre en compte le coefficient de dilatation thermique α (ou β pour l'austénite) des matériaux étudiés. Cependant une hypothèse est émise sur le coefficient de dilatation : sa valeur est supposée constante en fonction de la température pour chaque phase cristalline (respectivement pour la phase initiale et la phase gamma). On considérera donc deux coefficients de dilatation un pour la phase alpha et un pour la phase gamma, par conséquent la longueur et la section de l'éprouvette sont supposés varier de façon linéaire avec la température selon l'expression suivante :

$$\begin{aligned} l &= l_0 (1 + \alpha(T - T_0)) \text{ pour } T < T_1 \\ l &= l_0 (1 + \beta(T - T_0)) \text{ pour } T < T_3 \end{aligned} \quad (62)$$

où l est une longueur en m (soit la longueur de la zone utile, soit l'épaisseur ou la largeur), l_0 la longueur initiale, T et T_0 sont respectivement la température de l'éprouvette et la température ambiante et T_1 T_3 sont respectivement la température de début de changement de phase et la température de fin d'austénitisation. De même la variation de section est aussi prise en compte selon l'équation (62).

B. Résultats et discussion:

Comme prévu, on observe une augmentation de résistivité électrique avec la température et ce sur la plage de température considérée. Lorsque la température augmente, l'agitation thermique devient plus en plus élevée. De ce fait, le mouvement des électrons dans les échantillons est plus difficile, et par conséquent la conduction électrique devient aussi difficile.

Sur la Figure 33a, on peut noter deux domaines différents de la température. Ces domaines sont marqués par un changement dans la pente de la résistivité. Ce changement de pente reflète l'existence de deux phénomènes :

- D'une part à ces températures, il existe un changement d'état allotropique de la matière. Comme le montre le diagramme fer-carbone (Figure 33b), pour un acier, la gamme de températures comprise entre 750°C et 850°C correspond à une transformation de phase, d'un fer ferritique (phase alpha) à un fer austénitique (fer gamma). Cette transformation de phase métallurgique induit un changement dans le réseau cristallin. Le réseau cubique centré (CC) de la ferrite devient un réseau cubique face centrée (CFC) lors du passage dans le domaine austénitique. Le réseau CC est moins compact que réseau CFC (0,68 contre 0,74), les électrons circulent plus facilement dans la maille la plus dense. Donc l'évolution de la résistivité devient moins rapide.
- D'autre part, la présence de carbone impacte aussi la valeur de résistance électrique. En effet sur des structures ferritiques des amas de carbone sont visibles au milieu des grains de ferrite. Lors du passage à l'état austénitique ce carbone se retrouve en substitution ou en insertion dans le réseau atomique. Le carbone n'étant pas un très bon conducteur, la présence de ces

amas dans la phase ferritique freine le déplacement des électrons et donc augmente la résistivité électrique.

- A ces deux points peuvent venir s'ajouter des effets certes secondaires mais qui influent sur la résistivité électrique telle que la taille de grain, la présence de dislocation...

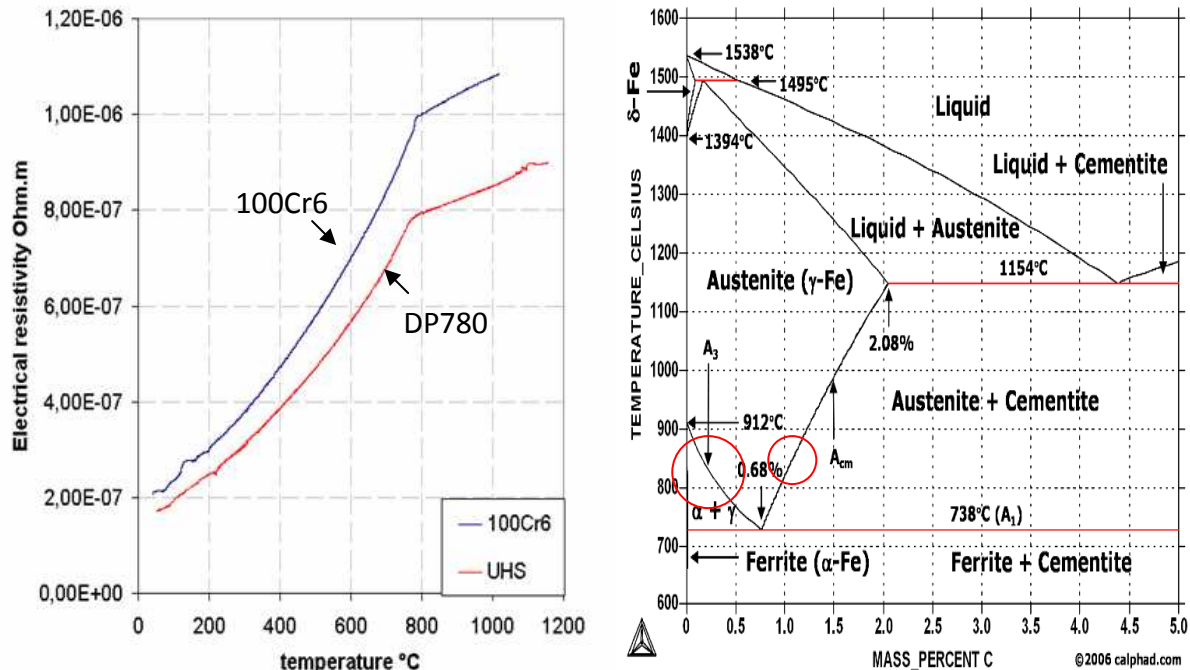


Figure 33: a) conductivité électrique des deux nuances 100Cr6 et DP780 b) diagramme de fer-carbone, les zones entourées correspondent aux changements de phases

En conséquence, les deux points précédents expliquent d'une part la présence d'un changement de pente dans la mesure des résistivités mais aussi le fait que les augmentations de résistivité électrique sont moins rapides dans le domaine gamma. D'autre part on peut expliquer le fait que la résistivité du 100Cr6 soit supérieure à celle du DP780 (Figure 33a).

C. La loi de Wiedemann-Franz

Wiedemann postule en 1853 dans [Wiedemann53] que dans les métaux, les conductivités électrique et thermique sont essentiellement dues aux mouvements des électrons libres à travers le réseau cristallin. Pour comprendre ce phénomène il faut revenir à la théorie de Drude Sommerfeld [Drude00]. Revenons donc aux mouvements des électrons dans un réseau cristallin. On considère que dans un intervalle dt une densité n d'électrons se déplace à une vitesse v , ce qui permet de redéfinir la densité de courant comme :

$$\mathbf{J} = -nev, \quad (63)$$

Sous l'application d'un champ électrique \mathbf{v} correspond à une vitesse de dérive des électrons. Ces vitesses sont uniquement dépendantes de la température. Dans ce modèle la conductivité électrique est définie comme :

$$\sigma_e = \frac{ne^2\tau}{m}, \quad (64)$$

où m est la masse d'un électron et τ est un temps de relaxation. Une expression similaire peut être déduite pour la conductivité thermique :

$$k = \frac{1}{3} v^2 \tau C_v, \quad (65)$$

où C_v est la chaleur spécifique à volume constant et v la vitesse moyenne. Par conséquent le rapport des conductivités en un point donné ne dépend que de la température locale. La loi de Wiedemann-Franz postule que le produit des conductivités à une température donnée est le même pour tous les métaux. De plus, ce rapport est directement proportionnel à la température. On pose que l'expression de v se déduit de la vitesse de Fermi : $v = 2\varepsilon_F / m$ où ε_F est l'énergie de Fermi et que la chaleur spécifique est elle issue de la théorie statistique quantique de Fermi $C_v = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{\varepsilon_F} n$. On obtient alors que l'équation qui relie les deux conductivités s'écrit :

$$\sigma_e = \frac{k}{L_e T} \quad (66)$$

Dans l'équation précédente, L_e est le nombre de Lorentz et T la température. Sa valeur théorique est donnée par:

$$L_e = \frac{\pi^2 k_B^2}{3e^2}. \quad (67)$$

$$L_e = 2.45 \times 10^{-8} V^2 K^{-2}.$$

Même si, en théorie, la relation existante entre la conductivité thermique et conductivité électrique montre un très bon accord celui-ci n'est pas parfait sur toute la gamme de températures (il s'avère être plus imparfait pour les faibles températures [Ashcroft 76]). Quant aux mesures effectuées, elles ont pu être comparées et validées à partir de mesures de conductivité thermique (**Figure 34**). Les courbes présentées **Figure 34** montrent un très bon accord entre les valeurs de résistivité électrique issues des données thermiques avec celles obtenues expérimentalement. Notamment, la présence du changement de phase est mise en évidence dans les deux cas.

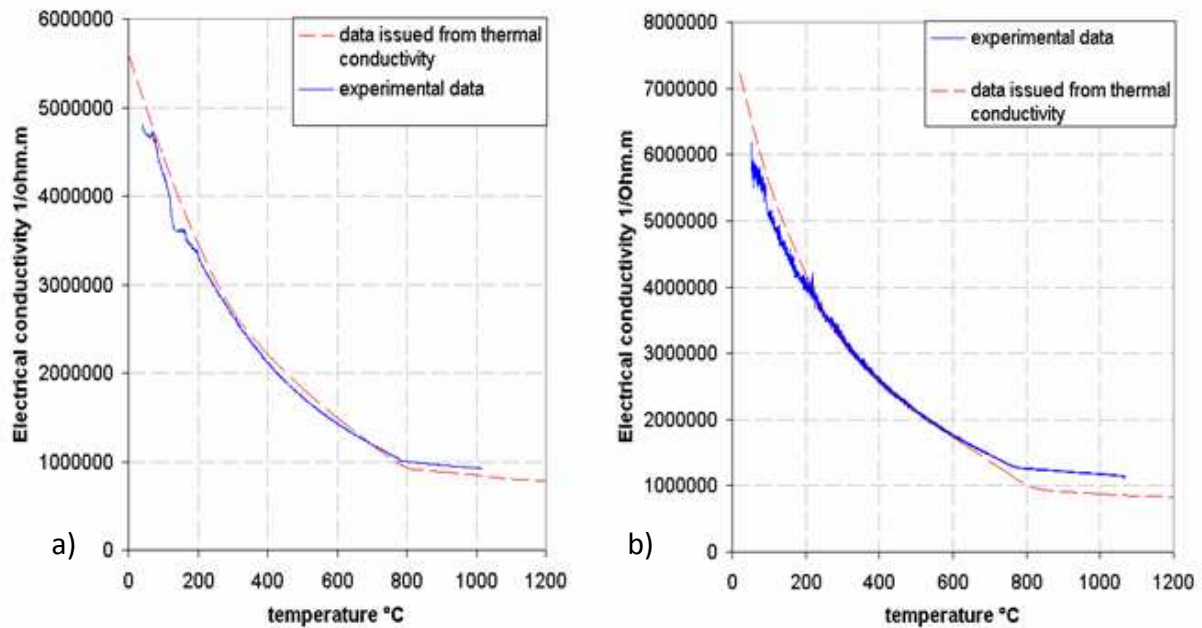


Figure 34: Comparaison entre les mesures expérimentales de la conductivité électrique et des données théoriques issues de la conductivité thermique. a) 100Cr6 et b) DP780

6.2 Résistances électriques de contact :

Le contact électrique s'établit lorsque deux solides conducteurs sont mis en contact l'un avec l'autre pour permettre le passage du courant à travers la surface. Cette interface présente une structure complexe dépendant de la surface des solides. L'étude et la prise en compte des résistances de contact s'avèrent être très importantes dans l'ensemble des procédés (en particulier pour les procédés d'assemblage) utilisant le chauffage par effet Joule. Dans notre cas, nous cherchons à déterminer quelle est la valeur et l'influence d'une résistance électrique provoquée par le serrage de l'éprouvette dans les mors. En effet, si la résistance électrique de contact au niveau des mors est suffisamment importante, on peut concevoir l'existence de sources de chaleur qui pourraient modifier le gradient thermique le long de l'éprouvette.

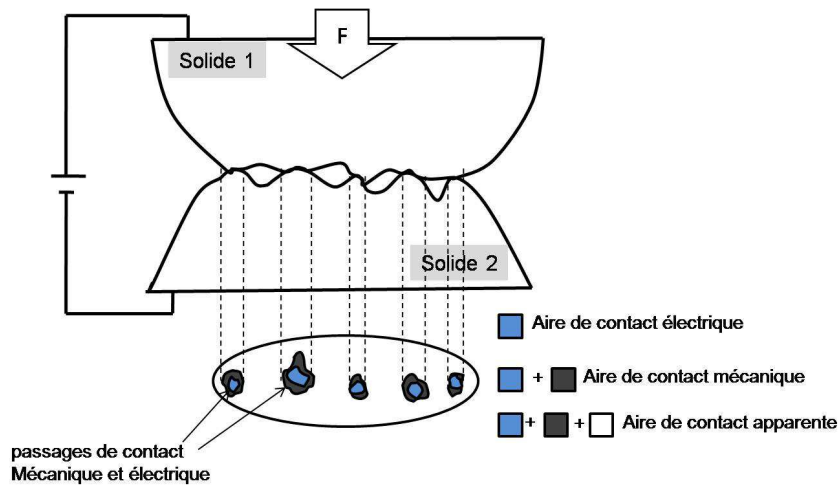


Figure 35: modèle d'une interface de contact entre deux solides déformables [Diop09].

Lors d'un contact électrique, on peut distinguer trois types de surface, la surface apparente de contact, la surface mécanique de contact et la surface électrique de contact. Les deux dernières représentent ce que l'on appelle la surface réelle de contact ; elles sont toutes deux dépendantes de la pression de contact lors d'une compression [Diop09]. Néanmoins, on distingue la surface électrique de contact de la surface mécanique de contact. Cette différence provient de la présence d'impuretés en surfaces, car ces impuretés isolantes tendent à diminuer la surface électrique de contact et donc à rendre inférieure à la surface mécanique de contact. Le comportement mécanique des surfaces est présenté dans [Monnier06].

Ces différentes surfaces de contact contribuent à introduire une résistance au passage du courant. On peut définir la résistance électrique de contact comme la somme de deux résistances, une résistance électrique due aux constriction des lignes de courant au travers des surfaces réelles de contact, et une résistance électrique de film, due à la présence d'un film isolant superficiel.

A. Résistance de film :

La prise en compte de cette résistance est complexe, car deux cas sont possibles :

- La conduction de type ohmique à travers le film. En fait, si on considère que le passage du courant se fait au travers d'un film d'épaisseur e , de résistivité électrique et de rayon a , on obtient, conformément à (60) :

$$R_{film} = \frac{\rho_e e}{\pi a^2}. \quad (68)$$

- Si l'on considère maintenant que la conduction n'est pas ohmique mais de type effet tunnel, il faut alors considérer les couches isolantes de type oxyde ou lubrifiant. La résistance peut être formulée :

$$R_{film} = \frac{f(e)}{\pi a^2}. \quad (69)$$

où $f(e)$ est une fonction à variation exponentielle. Elle varie très rapidement pour des faibles épaisseurs.

B. Résistance de striction

La résistance de striction est due à l'étranglement des lignes de courant dans les contacts élémentaires lors du passage au travers d'une interface. En effet, lorsque deux surfaces sont mises en contact, du fait des rugosités de surface, la surface réelle de contact est sensiblement inférieure à la surface apparente. Le contact entre les deux surfaces ne se fait qu'au travers de « spots ». Cette surface réelle de contact va varier sous l'action mécanique, et donc la résistance électrique de contact va dépendre de la pression de serrage et de la température.

Les « spots » dans la zone de contact, provoquent un resserrement des lignes de courant, et cette constriction des lignes de courant provoque une augmentation locale du potentiel.

Dans le cas de contact circulaire de rayon a , la résistance de contact peut être exprimé par :

$$R_{cons} = \frac{\rho_e}{2a}. \quad (70)$$

Du fait du courant qui le traverse et de la résistance qui lui est associée, le contact va s'échauffer. Pour calculer cet échauffement nous pouvons considérer la relation de Kohlrausch.

C. La relation de Kohlrausch

La relation de Kohlrausch est basée sur une hypothèse qui veut que les surfaces d'entrée et de sortie du courant soient à la fois surfaces équipotentiellles et isothermes. Dans ces conditions d'équivalence des équipotentiellles et des isothermes, Kohlrausch propose une relation qui lie la tension U aux bornes du contact à la température maximale T_m à l'interface de contact [Kohlrausch00]. Si les deux matériaux en contact sont identiques, la relation fondamentale de Kohlrausch s'écrit :

$$U^2 = 2 \int_{T_0}^{T_m} \rho_e k dT. \quad (71)$$

où ρ_e et k représentent respectivement la résistivité électrique et la conductivité thermique du matériau et T_0 est la température de la surface d'extrémité considérée.

Si ρ_e et k varient peu entre T_0 et T_m , la relation suivante peut être obtenue après intégration de l'expression précédente :

$$U^2 = 2\rho_e k (T_m - T_0). \quad (72)$$

Dans le cas d'un contact symétrique, en appelant U la tension aux bornes du contact la tension entre T_0 et T_m est en fait $\Delta U/2$. Dans ces conditions la relation pratique de Kohlrausch s'écrit :

$$\Delta U^2 = 8\rho_e k(T_m - T_0). \quad (73)$$

Cette expression montre que la relation entre la tension de contact et la température est indépendante de la géométrie des matériaux et de l'interface de contact.

Des mesures précises en fonction de la pression de contact et de la température peuvent être réalisées sur des pastilles de matière [Pradille10], mais dans le cas présent, comme l'élévation de température dans les mors demeure faible et que la pression de serrage ne varie pas au cours des essais, une simple mesure 4 fils autour de la zone de serrage dans les mors nous a permis de trouver un ordre de grandeur de résistance électrique de contact. Une valeur de résistance électrique de contact de $10^{-8} \Omega m^2$ sera considérée lors des simulations numériques.

6.3 Mesure d'émissivité:

L'émissivité est un paramètre indispensable pour simuler correctement les échanges thermiques avec le milieu ambiant, d'autant plus que son rôle devient prépondérant à haute température (loi en T^4).

A. Les principes de l'émissivité

Lorsqu'un rayon incident impacte une surface, une partie de ce rayon est réfléchi, l'autre partie étant soit absorbée soit transmise.

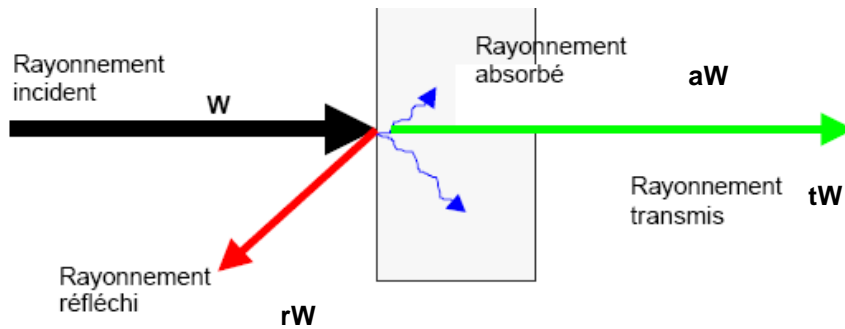


Figure 36: modèle de rayonnement pour un milieu complexe

La somme des facteurs d'absorption, de réflexion et de transmission (respectivement α , ρ et τ) est égale à 1. Par conséquent, on peut écrire :

$$a + r + t = 1 \quad (74)$$

Pour des corps suffisamment épais, on peut les considérer comme opaques, ainsi leur transmission devient nulle et donc :

$$a + r = I^{\cdot\cdot} \quad (75)$$

Pour calculer l'émissivité thermique d'un matériau, il est nécessaire de connaître l'absorptivité du métal dans le domaine spectral du corps noir. En utilisant les lois de Kirschoff, l'absorptivité spectrale à une température donnée est égale à l'émissivité spectrale à la même température. Dans le cas du corps noir qui absorbe la totalité de l'énergie, ceci correspond à une émissivité égale à 1.

L'émissivité correspond au rapport d'énergie qu'un corps rayonne par rapport à celle qu'un corps noir rayonnerait à la même température.

$$\varepsilon_r = \frac{L_{mat}}{L_{corps_noir}}. \quad (76)$$

L'intérêt du corps noir est que sa luminance monochromatique L ne dépend que de la longueur d'onde et de la température T , et sa valeur est donnée par la loi de Planck. La loi de Planck permet de définir la puissance spectrale émise par un élément de surface d'un corps noir dans une direction par unité de fréquence et par unité d'angle solide :

$$L_{corps_noir} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{2\pi c} \right)^2 \frac{\hbar \omega^3}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1}. \quad (77)$$

où ω est la fréquence angulaire, c la vitesse de la lumière dans le vide, \hbar la constante de Planck divisé par deux π et k_B la constante de boltzmann. Elle s'écrit aussi :

$$L_{corps_noir} = \frac{2h}{c^2} \nu^3 \frac{1}{e^{\hbar \nu / k_B T} - 1}. \quad (78)$$

où h est la constante de Planck ($\hbar = h / 2\pi$). Tous les autres corps possèdent une émissivité inférieure à 1. Des abaques ont été réalisés permettant de lister l'émissivité de l'ensemble des matériaux. La connaissance de cette grandeur est fondamentale pour une bonne mesure en thermographie infrarouge. Pour des températures inférieures à 900°C il est envisageable d'appliquer sur l'éprouvette une peinture dont on connaît l'émissivité, mais pour des températures supérieures la couche de peinture se détériore très rapidement.

B. Vers une valeur analytique de l'émissivité

Pour les métaux ayant une bonne conductivité électrique et thermique, le modèle d'électron libre de Drude peut être combiné avec les équations de Maxwell pour trouver l'absorptivité et l'émissivité des surfaces métalliques. Cette approche a été appliquée moyennant quelques hypothèses pour trouver des expressions reliant l'émissivité à la conductivité électrique. Sievers [Sievers78] et Roger [Roger79] présentent un résumé complet des différents travaux.

Ici nous ne considérerons que deux approches, celle simplifiée de Davisson et Weeks [Davisson 24] qui se base sur la relation de Hagen Ruben (c'est-à-dire une relation simplifiée du modèle de Drude) :

$$\varepsilon_r = 0,754(\rho_e T)^{0.5} - 0,632\rho_e T + 0,670(\rho_e T)^{1.5} - 0,607(\rho_e T)^2. \quad (79)$$

D'autres développements menés par Parker et Abbott [Parker65] ont permis d'inclure dans l'expression de l'émissivité un paramètre de relaxation du métal. L'expression ainsi obtenue peut s'écrire :

$$\varepsilon_r = 0,281(\rho_e T)^{0.5} - (0,153 - 0,0109 \ln \rho_e T)\rho_e T + 0,0461(\rho_e T)^{1.5}. \quad (80)$$

Ces formules permettent de trouver les variations d'émissivité dans des conditions parfaites de radiation, c'est-à-dire sans variation d'état de surface ; c'est pourquoi nous nous sommes intéressés à mesurer des ordres de grandeur d'émissivité.

C. Evolutions et mesures de l'émissivité

Lorsqu'un film d'oxyde se développe sur la surface d'une éprouvette métallique, l'émissivité de la surface change drastiquement [Bauer03]. De plus même si la surface demeure la même durant tout l'essai, du fait de l'élévation de la température l'émissivité tend à varier [Roger79] [Lund52].

Ces variations d'émissivité sont connues pour provoquer de très importantes erreurs d'évaluation de la température dans les mesures thermographiques. Donc bien connaître l'émissivité est indispensable pour la mesure précise de la température d'une cible. De plus, du fait de l'utilisation d'une loi en T^4 pour le rayonnement, l'émissivité est également très importante pour obtenir une reproduction fidèle des pertes par rayonnement thermique en simulation thermique. En effet, comme une conséquence de l'équation (35), le flux radiatif dépend considérablement de l'émissivité. Une erreur dans la valeur des variations d'émissivité peut modifier considérablement le profil de température simulé sur un échantillon. Il faut noter qu'un volume important de données expérimentales pour les valeurs d'émissivité de métal est disponible et bien les utiliser reste difficile.

Nous nous sommes intéressés à mesurer l'émissivité sur nos nuances d'acier. [Kobayashi99] [Barnes47] présentent des techniques expérimentales pour déterminer de manière précise l'émissivité. Ces techniques s'avèrent être lourdes à mettre en place, par conséquent nous nous sommes contentés de réaliser de simple mesures thermographiques à l'aide d'une caméra thermique Flir-Cedip. En effet ces caméras de mesures possédant des bandes spectrales assez étroites, elles permettent la mesure de la luminance monochromatique d'un corps à température T .

A partir d'essais Taboo et d'une mesure caméra thermique, il nous est possible de remonter à l'émissivité des éprouvettes. En effet la caméra thermique mesure un flux émis par l'éprouvette. A partir de la loi de Planck, on connaît la luminance. Il est nécessaire d'utiliser la loi de Planck et non la loi de Wien. En effet, la caméra thermique mesurant la luminance sur une bande de longueur d'onde étroite, l'émissivité variant avec la longueur d'onde [Taylor51], la loi de Stefan Boltzmann n'est plus valable. En utilisant la loi de Planck, il est possible de trouver la température en un point, cela suppose de connaître parfaitement l'émissivité ; mais si on suppose comme parfaitement connue la température en ce point (via par exemple une mesure de thermocouple) il est devenu assez simple d'en déduire l'émissivité du matériau.

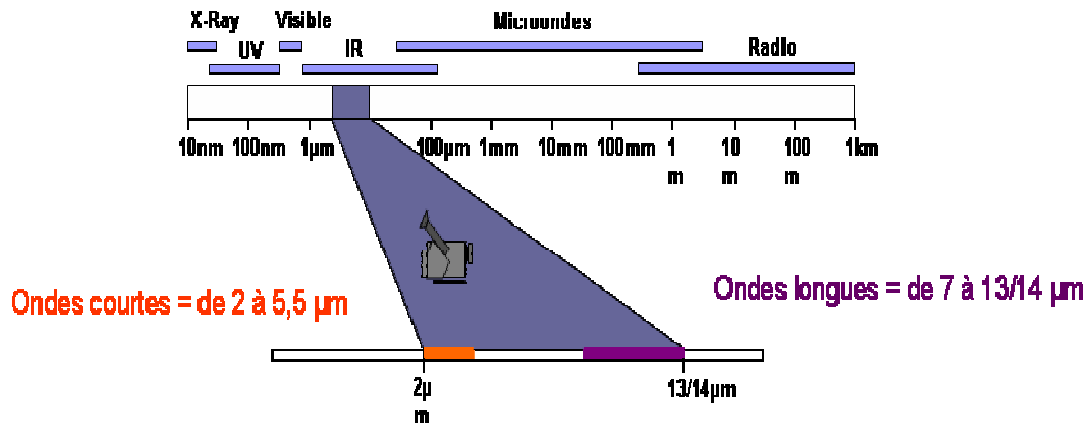


Figure 37: gamme de fonctionnement des caméras thermiques

En effet, comme le montre les équations (76) et (77), connaissant une courbe de luminance en fonction de la température du corps noir pour une longueur d'onde donnée (étalonnage caméra), et connaissant l'émissivité du corps sur lequel on réalise une mesure, il est possible, à partir de la luminance émise par ce corps de remonter à sa température. Ce schéma est le principe même du fonctionnement d'une caméra thermique.

Si on modifie les données initiales, et qu'on suppose connue non plus l'émissivité mais la température en un point, en mesurant la luminance de ce point il est possible de trouver l'émissivité en ce point.

Pour connaître la température en un point, nous avons placé un thermocouple sur nos échantillons ; ainsi les mesures caméra thermique ont pu être recalées sur des mesures par thermocouples soudés sur les échantillons. Malgré l'importante incertitude de ce type de mesure, il est possible de connaître une émissivité moyenne pour une surface non oxydée, pour une surface oxydée et la température à laquelle s'effectue la transition.

Nos mesures présentées Figure 38, confirment les observations de Lund et permettent de montrer qu'à basse température, pour un échantillon à l'air libre ou pour un échantillon placé dans une enceinte inertée, la valeur de l'émissivité est logiquement la même. Les différences apparaissent dès lors que des changements de surface apparaissent, notamment pour l'échantillon à l'air libre. Pour des températures proches de 300°C la surface s'assombrit, ce qui change l'émissivité. A plus haute température, du fait de l'apparition d'une couche d'oxyde, l'émissivité mesurée sur l'éprouvette placée à l'air libre, n'est plus celle de l'acier mais plutôt celle de la couche d'oxyde.

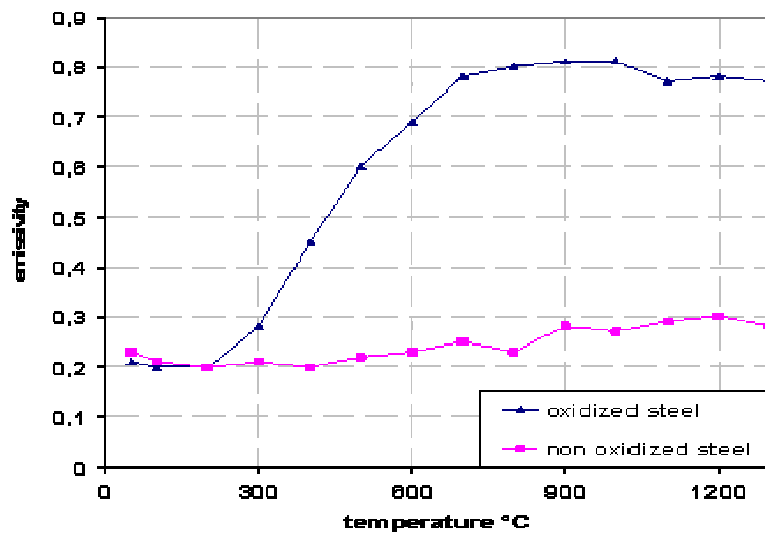


Figure 38: variation de l'émissivité en fonction de la température et de l'état d'oxydation des échantillons (acier ST 52)

Les variations observées et les températures de transition sont du même ordre que celles rencontrées dans la littérature [Paloposki05]. Lund montre que les variations d'émissivité dues à la température sont assez faibles pour les aciers. Par conséquent, comme l'incertitude sur la valeur de l'émissivité est aussi grande que les variations dues à la température, nous considérerons que l'émissivité est constante en fonction de la température. Nous ne prendrons en compte que l'effet de l'oxydation.

Pour l'ensemble des simulations numériques, sur une surface non oxydée, nous prendrons une émissivité de 0.25 et de 0.8 quand la surface est recouverte d'oxyde.

7. Validations numériques

7.1 Validation de la loi d'Ohm, couplage thermique en mono domaine

On considère comme cas test un échantillon cylindrique sur lequel on impose à une extrémité un potentiel nul et à l'autre extrémité une densité de courant constante (Figure 39). Toutes les surfaces libres sont considérées comme étant adiabatiques. Les paramètres et les dimensions sont résumés dans le tableau de la Figure 39.

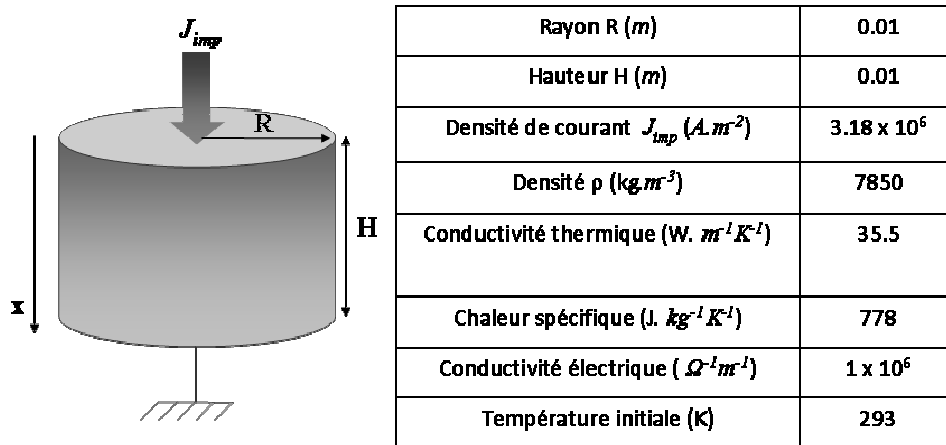


Figure 39: géométrie utilisée pour validation. Les paramètres qui lui sont associés sont présentés dans le tableau.

A partir de l'expression (60) reliant la conductivité électrique et la résistance électrique, rappelée ici :

$$R_e = \rho_e \frac{L}{S} \quad (81)$$

il est possible de définir une résistance électrique équivalente pour un objet de longueur L et de section S. Pour la géométrie présentée à la Figure 39, et pour les paramètres résumés dans le tableau de la Figure 39, nous pouvons calculer la résistance électrique du lopin cylindrique :

$$R_e = \frac{1}{\pi} \times 10^{-4} \approx 3.18 \times 10^{-5} \Omega \quad (82)$$

Si on applique sur ce lopin une intensité électrique de 1000A (ce qui équivaut à une densité de courant imposée d'environ $3.18 \times 10^6 A.m^{-2}$), en utilisant la loi d'Ohm, on peut déduire la différence de potentiel engendrée par la résistance électrique que représente le lopin. La solution analytique pour le potentiel électrique est 0,031831 V.

Nous pouvons calculer l'échauffement provoqué par le courant circulant dans le lopin. Dans des conditions adiabatiques, l'échauffement exprimé par l'équation (32) peut être écrit comme suit:

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} = \sigma_e \nabla U^2 \quad (83)$$

Grâce à cette expression, pour une différence de potentiel donnée ΔU , l'élévation de température pendant un intervalle de temps Δt est donnée par:

$$\frac{\Delta T}{\Delta t} = \frac{\sigma_e}{\rho C_p} \frac{\Delta U^2}{L^2} \quad (84)$$

A partir de cette expression et de la valeur théorique du potentiel il est possible de déduire l'échauffement à la fin du calcul (ici après un temps réel de 10s). La température théorique est de 36.59°C

Numériquement la valeur trouvée pour le potentiel est de 0.0318313V ce qui équivaut à une erreur de 10^{-3} % par rapport à la valeur théorique, en ce qui concerne l'échauffement, à la fin de la simulation, une température de 36.51°C a été atteinte, ce qui représente une erreur de 0.2%. Comme la solution du problème est linéaire, la précision des résultats est indépendante du maillage.

7.2 Validation de la loi d'Ohm, couplage thermique en multi domaines

Dans cette partie, on considère le problème de contact entre deux corps, avec des géométries similaires à celle présentée Figure 29. Il s'agit de deux cylindres placés en contact. Cet empilement sur lequel on impose à une extrémité un potentiel nul et à l'autre extrémité une densité de courant constante (Figure 40) possède une interface de contact imparfaite induisant l'apparition de résistance électrique de contact à l'interface. Toutes les autres surfaces libres sont considérées comme étant adiabatiques. Les paramètres et les dimensions sont résumés dans le tableau ci-dessous.

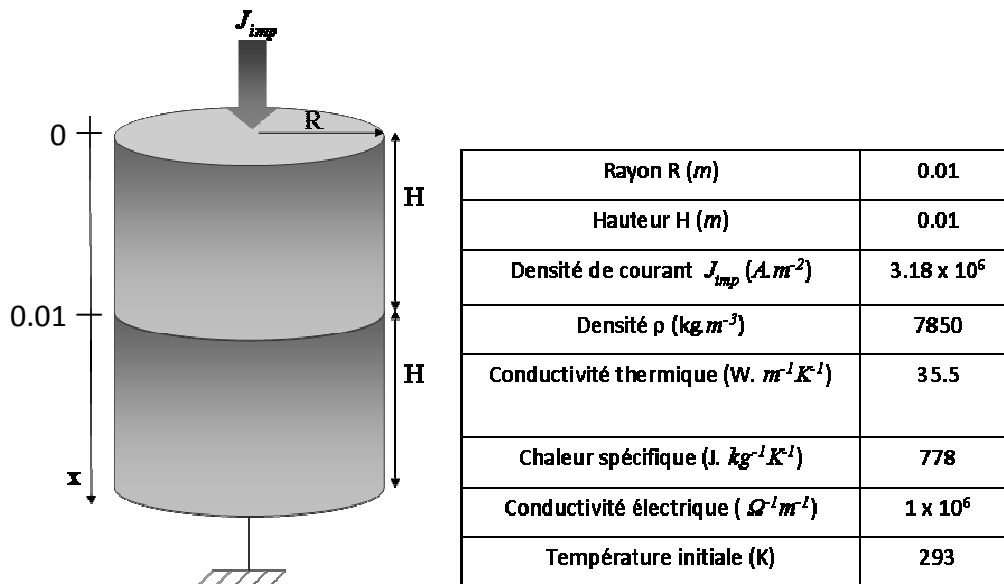


Figure 40: géométrie utilisée pour les validations, tableau des paramètres associés

Dans cette partie, nous allons réaliser plusieurs essais de validation aussi bien en terme de distribution de courant le long des deux domaines, que pour l'influence de la résistance électrique de contact sur la différence de potentiel et sur l'échauffement. De plus, nous étudierons l'influence du type de maillage à l'interface. En fait, chaque calcul a été

effectué dans un premier temps avec un maillage coïncident pour le contact d'interface, puis avec un maillage non coïncident.

De la même manière que précédemment, nous pouvons calculer sur chacun des sous-domaines une différence de potentiel. Celle-ci est donnée par les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} U_1 &= \frac{J_{imp}}{\sigma_e} x \text{ pour le sous-domaine 1 } (x < 0.01) \\ U_2 &= \frac{J_{imp}}{\sigma_e} (x - H) \text{ pour le sous-domaine 2 } (x > 0.01) \end{aligned} \quad (85)$$

où x représente la coordonnée spatiale. A ces expressions s'ajoute une résistance électrique de contact ; celle-ci provoque un saut de potentiel à l'interface. La différence de potentiel induite par cette résistance électrique de contact découle de l'équation (37) et peut donc s'écrire :

$$U_{cont} = \frac{J_{imp}}{\sigma_{elect_contact}} \quad (86)$$

où U_{cont} est le saut de potentiel dû à la résistance électrique de l'interface. En résumé, la distribution de potentiel le long des deux sous domaines peut s'écrire :

$$\begin{aligned} U(x) &= \frac{J_{imp}}{\sigma_e} x \quad \text{pour } 0 \leq x \leq 0.01 \\ U(x) &= \frac{J_{imp}}{\sigma_e} H + \frac{J_{imp}}{\sigma_{elect_contact}} + \frac{J_{imp}}{\sigma_e} (x - H) \quad \text{pour } 0.01 \leq x \leq 0.02 \end{aligned} \quad (87)$$

La solution analytique est comparée à la solution numérique dans la

Figure 41. Dans cet exemple, nous avons considéré une résistance électrique de contact égale à $10^{-7} \Omega^{-1} m^{-2}$. Nous constatons que la solution analytique et la solution numérique sont très proches, aussi bien le long de chaque lopin qu'autour de l'interface.

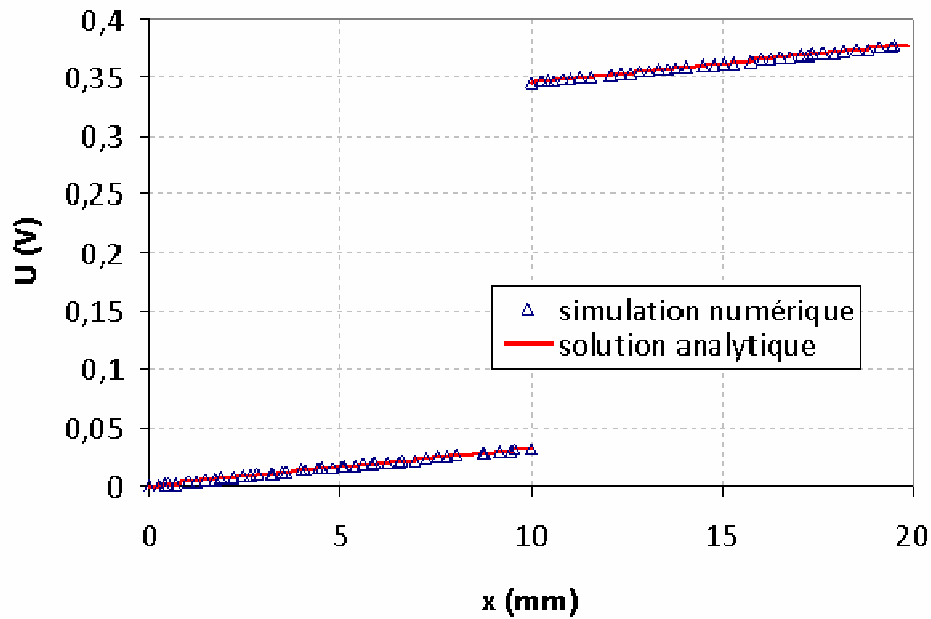


Figure 41: comparaison du potentiel obtenu analytiquement et numériquement dans le cas d'un contact imparfait entre deux domaines conducteurs (résistance de contact $10^{-7} \Omega^{-1} \text{m}^2$).

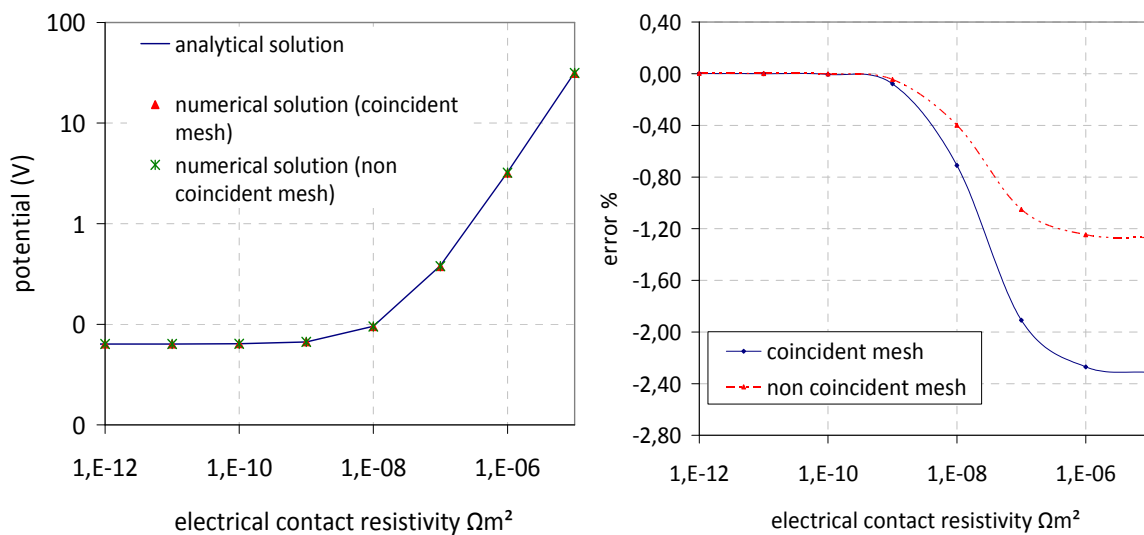


Figure 42: contact des deux conducteurs avec résistance électrique de contact : comparaison des prédictions analytiques et numériques du saut de potentiel. La solution numérique est calculée une première fois avec un maillage coïncident puis avec un maillage non coïncident. Comparaison de l'erreur pour la résolution numérique.

Le même calcul a été réalisé pour différentes valeurs de résistance électrique de contact, dans le cas d'un maillage coïncident et dans le cas d'un maillage non coïncident. L'ensemble des mesures ainsi que l'erreur à la solution exacte sont résumées dans la Figure 44. Pour chacun des maillages, on définit l'erreur comme étant :

$$erreur = 100 \times \frac{U_{simulé} - U_{analytique}}{U_{analytique}}$$

On peut noter que les résultats pour un maillage non coïncident sont plus proches de la solution analytique que ceux obtenus pour un maillage coïncident.

Nous l'avons déjà abordé, mais cette résistance électrique de contact provoque un échauffement local. Comme les deux domaines sont considérés identiques, la puissance générée à l'interface par effet Joule peut se diviser en deux. Par conséquent sur un domaine, on peut écrire, dans des conditions adiabatiques, que :

Sur l'interface située en $x=0$, du fait des conditions adiabatiques, le flux de chaleur extrait est nul, donc :

$$k \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad (88)$$

Sur l'interface en contact avec l'autre lopin, on considère une source de chaleur produite par la résistance électrique de contact :

$$k \frac{\partial T}{\partial x} = \pm \frac{1}{2} P_{interface}^{Joule} \quad (89)$$

Entre les deux interfaces nous avons une conduction couplée à un chauffage par effet Joule :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \sigma_e \nabla U^2 \quad (90)$$

La résolution de cette équation différentielle par transformée de Laplace est détaillée dans Carslaw and Jaeger [Carslaw 59]. Au temps t , la distribution de température le long du sous-domaine est décrite par l'expression suivante :

$$T = T_0 + \frac{1}{\rho C_p} \sigma_e \nabla U^2 t + \frac{P_{interface}^{Joule} t}{2 \rho C_p L} + \frac{P_{interface}^{Joule} L}{2k} \left\{ \frac{3x^2 - L^2}{6L^2} - \frac{2}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^2} e^{\frac{-kn^2\pi^2 t}{L^2}} \cos \frac{n\pi x}{L} \right\} \quad (91)$$

La Figure 43 nous permet de constater que la simulation de la distribution de température le long des deux sous-domaines est particulièrement bien prise en compte.

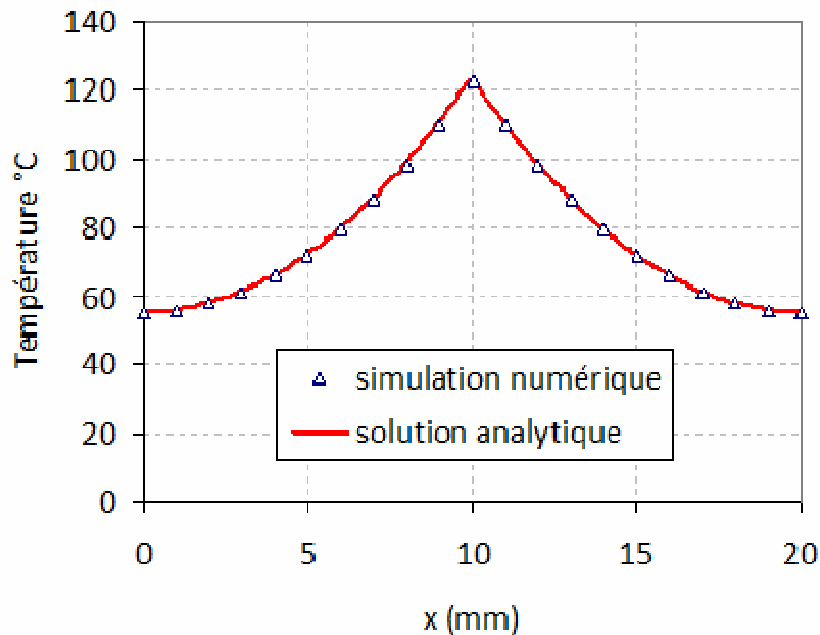


Figure 43: comparaison numérique/analytique de la distribution de température, dans le cas particulier où l'échauffement est principalement provoqué par effet Joule incluant l'existence d'une résistance électrique de contact à l'interface.

8. Régulation de la température: modélisation de la boucle PID

Sur la machine d'essai Taboo, ou sur Gleeble, la régulation de la température de l'éprouvette se fait via une boucle de régulation en PID (pour proportionnelle – intégrale - dérivée). Une boucle PID est une régulation en boucle fermée permettant de modifier des paramètres machine au regard d'une consigne imposée. Les trois actions permettent des réponses différentes, ci-dessous sont décrites les conséquences de chacune des actions.

- L'action proportionnelle P permet d'accélérer la réponse du procédé proportionnellement à l'écart mesure-consigne. P donne la nervosité du régulateur PID
- L'action intégrale I complète l'action P en annulant l'erreur résiduelle sans modifier la réaction du régulateur PID.
- L'action dérivée D permet de compenser les effets du temps mort du procédé et améliore la stabilité de la boucle en amortissant rapidement les oscillations provoquées par une perturbation ou un changement brusque de la consigne.

Par conséquent, afin de reproduire le plus fidèlement possible les conditions d'essais, nous souhaitons suivre le même cheminement en température lors des simulations numériques et des essais Taboo. Dans cette optique, une régulation de la température par une boucle PID a été mise en place dans le code numérique. Comme lors des essais, la température mesurée par un capteur (ou thermocouple) est comparée à une consigne. La température calculée est mesurée sur un nœud situé en position centrale sur la surface de l'échantillon. En fonction de l'erreur obtenue la puissance électrique (ici la densité de courant) injectée est régulée via l'utilisation d'une boucle de régulation en PID.

Selon les conditions aux limites, un potentiel nul est imposé sur une surface, et une densité de courant électrique est imposée sur l'autre surface. À chaque incrément de temps la nouvelle valeur de la densité de courant J_{imp} est calculée en fonction des erreurs entre les valeurs calculées et prévues de la température :

$$J_{imp}^t = K_p \times error^t + K_i \sum_{t=0}^t error^t + K_d \times (error^t - error^{t-1}) \quad (92)$$

où K_p , K_i et K_d sont des constantes associées respectivement aux termes proportionnel, intégral et dérivé. L'erreur est calculée comme suit :

$$error = T_{prescribed} - T_{calc} \quad (93)$$

La Figure 44 présente un exemple de régulation en PID sur une consigne de température évoluant par palier. On constate que la température simulée suit parfaitement la consigne imposée.

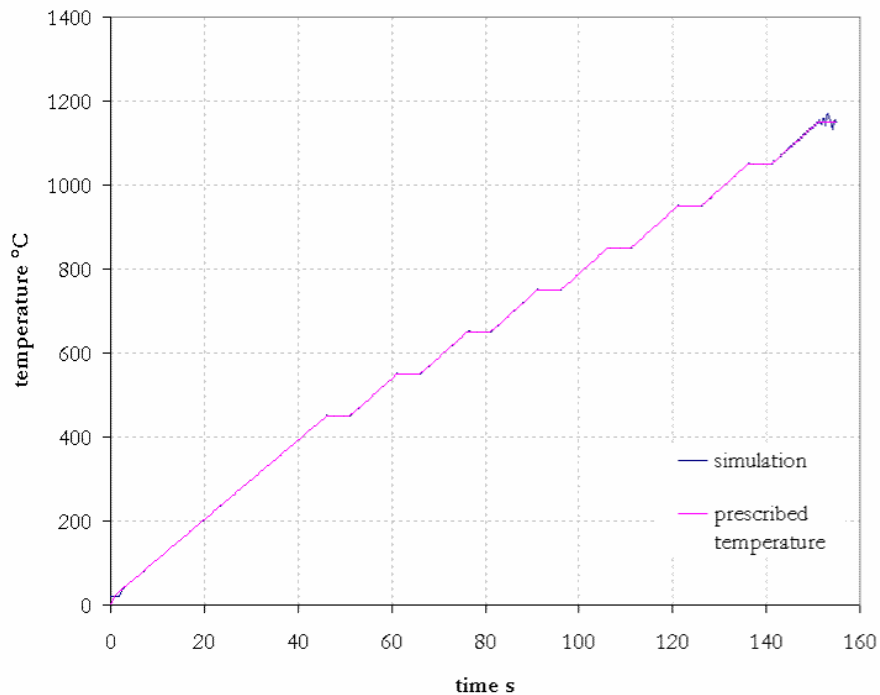


Figure 44 : exemple d'une régulation de la température lors d'une simulation numérique

9. Stratégie de simulation et validations :

La modélisation des essais Taboo ou Gleeble est soumise à plusieurs contraintes que nous allons détailler ci-dessous. Ainsi, nous avons adapté les moyens de simulation numérique en fonction de ces contraintes :

- D'une part, comme nous le verrons dans le chapitre suivant, afin de déterminer les paramètres des lois de comportement à partir des essais Taboo ou Gleeble nous avons opté pour l'utilisation d'un algorithme d'analyse inverse. Un des problèmes inhérents à cette méthode d'analyse est le grand nombre de calculs numériques pour converger vers la meilleure solution. C'est pourquoi la recherche du gain de temps a été primordiale dans cette analyse.
- D'autre part, comme nous avons vu précédemment les essais Taboo sont composés d'une phase de mise en température et d'homogénéisation suivie d'une phase d'essai. Du fait des températures élevées et des gradients thermiques visibles le long de l'éprouvette, au Cemef une méthode non intrusive laser est utilisée pour mesurer les champs de déplacement lors de l'essai de traction. Par conséquent cette technique de mesure nous oblige à utiliser des éprouvettes planes.

Une approche légèrement différente a été adoptée pour la simulation Gleeble et la simulation Taboo. Cette différence provient essentiellement de la géométrie initiale des éprouvettes Gleeble et Taboo. En effet, les éprouvettes utilisées sur la Gleeble sont cylindriques tandis que celles utilisées sur Taboo sont planes.

Dans le cas des essais Gleeble, nous adoptons une formulation 2D axisymétrique pour la modélisation de l'ensemble des phénomènes (électrique, thermique, mécanique).

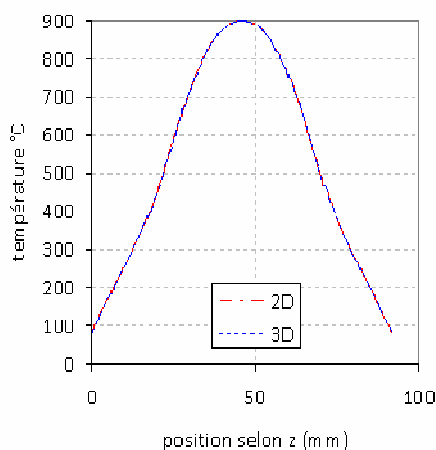


Figure 45 : distribution de température à la fin du chauffage (2D) et avant l'essai mécanique (3D)

Le cas des éprouvettes plates des essais Taboo est plus complexe. Nous aurions pu développer une simulation unique 3D pour l'ensemble des phénomènes. En fait, pour des raisons que nous exposerons par la suite, nous avons choisi d'utiliser d'une part un modèle 2D plan pour l'électrique et la thermique (en le modifiant pour prendre en compte les flux thermiques à travers les grandes faces, comme expliqué dans le paragraphe suivant), et d'autre part un modèle 3D complet pour la résolution mécanique. Plus précisément, le modèle 2D plan électrique-thermique est utilisé pour modéliser la phase de chauffage. Pendant l'essai mécanique, nous considérons que la distribution de température ne varie pas. Comme le montre la Figure 45, le transport du champ de température entre le cas 2D et le cas 3D s'effectue correctement

En d'autres termes, le couplage retour de la mécanique vers les problèmes électrique et thermique est ignoré, ce qui semble admissible eu égard aux petites déformations considérées. Dans ces conditions, la simulation de la phase de traction des essais est modélisée en thermo-mécanique « pure » avec une formulation 3D. Le terme thermo-mécanique « pure » signifie que nous nous plaçons dans des conditions adiabatiques, et avec une conductivité thermique arbitrairement basse afin d'éviter l'homogénéisation de la température dans l'éprouvette.

9.1 Modélisation de l'essai Taboo

A. Modélisation électrique- thermique : approche 2D plane

a) Validation de l'approche 2D

Une approximation 2D plane d'une géométrie n'est thermiquement valable que si le gradient thermique dans l'épaisseur est faible. En effet ne pouvant simuler dans une telle approche qu'une tranche de l'éprouvette cela signifie que sur la même éprouvette 3D le champ de température doit être le même.

Analytiquement nous pouvons donner un majorant du gradient thermique dans l'épaisseur d'une éprouvette Taboo ; pour cela considérons l'équation :

$$\varphi = h_c (T - T_{ext}) + \varepsilon_r \sigma_B (T^4 - T_{ext}^4) \quad (94)$$

Posons $T = 1200^\circ\text{C}$, $T_{ext} = 0^\circ\text{C}$, $h_c = 10 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$ et $\varepsilon_r = 0,8$. Ainsi nous pouvons calculer la puissance dissipée par convection et par rayonnement :

$$\begin{aligned} \varphi_{conv} &= h_c (T - T_{ext}) = 12000 \text{ Wm}^{-2} \\ \varphi_{ray} &= \varepsilon_r \sigma_B (T^4 - T_{ext}^4) = 213290 \text{ Wm}^{-2} \end{aligned} \quad (95)$$

Sachant que $\phi = k \nabla T$, un majorant du gradient thermique est donné pour une variation linéaire de la température dans l'épaisseur de l'éprouvette, c'est-à-dire :

$$\phi = k \frac{\Delta T}{e/2}.$$

Donc pour une conductivité thermique $k = 30 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ et une épaisseur $e = 2 \text{ mm}$, on trouve une différence de température d'environ 7°C dans l'épaisseur.

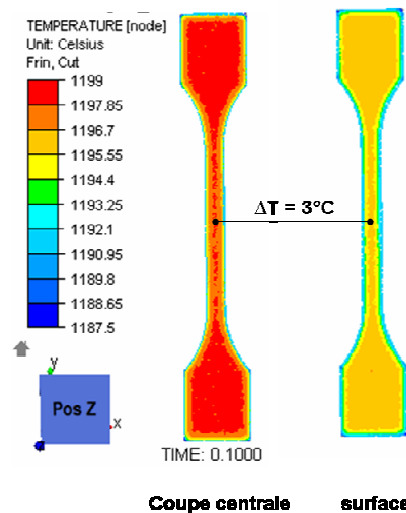


Figure 46 : comparaison du champ thermique sur une éprouvette Taboo. Coupe centrale et champ en surface.

La Figure 46 confirme elle aussi que d'un point de vue thermique, une approche 2D semble justifiée notamment du fait de la faible épaisseur des éprouvettes qui ne produit pas de grands écarts de température entre la partie centrale et la surface. D'après la Figure 46 qui présente deux cartes thermiques distinctes, une prise au centre de l'éprouvette ($z=1 \text{ mm}$), l'autre prise en surface ($z=0 \text{ mm}$), la différence de température simulée est d'environ 3°C dans l'épaisseur.

b) Nouvelles conditions aux limites:

Nous venons de voir que l'approximation 2D est valide d'un point de vue thermique. Néanmoins cette approximation nécessite quelques adaptations pour pouvoir être utilisée correctement. En effet dans une approximation 2D plane, puisque le flux sur la grande surface de l'échantillon n'est pas considéré, il est nécessaire d'ajouter un terme de puits de chaleur exprimé en volume.

Une nouvelle source volumique

Nous exprimerons ici chacune des nouvelles sources. Si on considère un élément de volume V , de surface S et d'épaisseur e . Une représentation schématique de cet élément de volume et de son approximation 2D peut-être présentée ainsi :

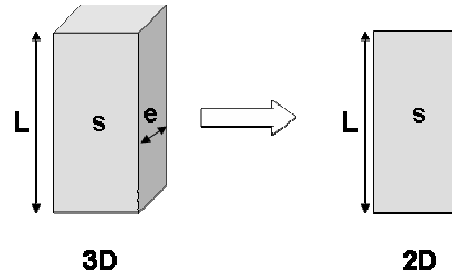


Figure 47: Comparaison entre une approche 3D (à gauche) et une approche 2D (à droite).

D'après l'équation (35), la surface S de l'élément de volume V émet une puissance surfacique égale à :

$$P_s = S\varphi_{ther}, \quad (96)$$

$$\text{où } \varphi_{ther} = h(T - T_{ext}) + \varepsilon_r \sigma_B (T^4 - T_{ext}^4)$$

Ainsi la puissance surfacique émise par un élément de volume V via ses 2 faces est :

$$P_{s_total} = 2P_s, \quad (97)$$

Afin de compenser la différence des pertes entre le modèle 3D et l'approximation 2D, nous devons rajouter un terme de puits volumique de chaleur. La puissance volumique P_v pour compenser les pertes dues aux surfaces S peut s'écrire :

$$P_v = \frac{2}{e} \varphi_{ther}, \quad (98)$$

Si l'on considère la géométrie de notre éprouvette avec deux conditions différentes, c'est-à-dire une partie de l'éprouvette en contact avec l'air (la zone utile), une autre partie en contact avec des outils (partie dans les mors). Sur la surface libre, une condition aux limites de rayonnement et de convection est imposée comme définie précédemment dans l'équation (96). Cette condition doit être exprimée sous une forme volumique (98) et incluse dans l'équation (32). Un autre flux volumique doit être inclus dans l'équation (39) pour prendre en compte le flux de chaleur par conduction dans les mors. La figure ci-dessous présente un résumé des conditions aux limites :

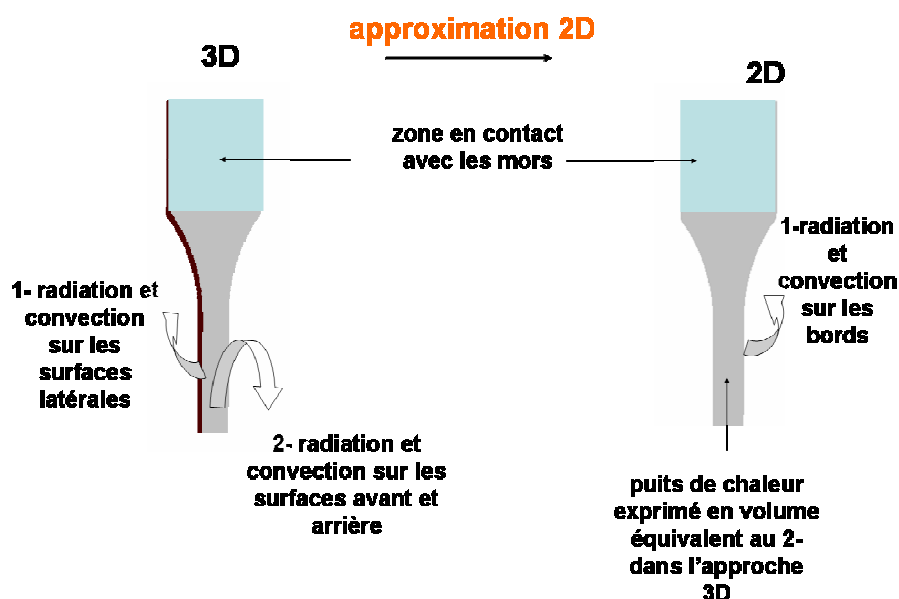
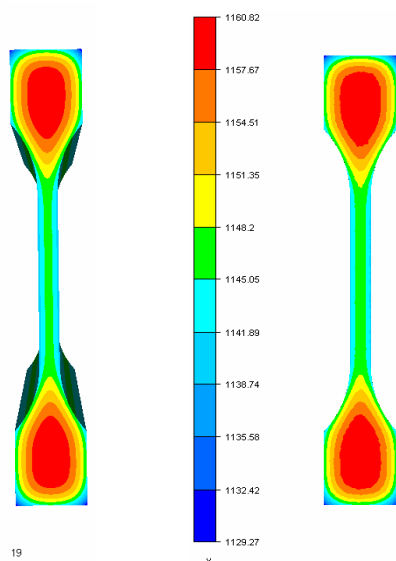


Figure 48: Résumé des conditions aux limites pour une approche 2D de la modélisation thermique des éprouvettes plates Taboo.

c) Validations des nouvelles conditions aux limites: thermique pure sur des éprouvettes

Afin de valider les modifications réalisées, nous avons simulé le refroidissement d'une éprouvette en formulation 2D plan modifiée et en 3D. L'éprouvette a une température initiale homogène de 1200°C. Des conditions en convection-radiation sont appliquées sur toutes les surfaces libres (y compris au niveau des têtes des éprouvettes). Comme le montre la Figure 49 la comparaison entre les deux calculs permet de valider totalement l'approche 2D modifiée.



**Figure 49: refroidissement des échantillons à partir d'une température de 1200°C (t=1s).
Comparaison entre une approche 3D (à gauche) et une approche 2D (à droite).**

Plus précisément, la Figure 50 montre une différence de température de 3°C après 15s de refroidissement pour le profil de température selon la largeur de l'éprouvette. On note sur cette image les deux points chauds au niveau des têtes des éprouvettes ; en effet, comme des conditions en convection rayonnement ont été appliqués sur toute la surface de l'éprouvette, les zones les plus massives restent plus chaudes. L'erreur constatée conforte notre estimation initiale et valide cette approche 2D plane. Par conséquent, une telle approche sera utilisée pour la simulation des problèmes électriques thermiques.

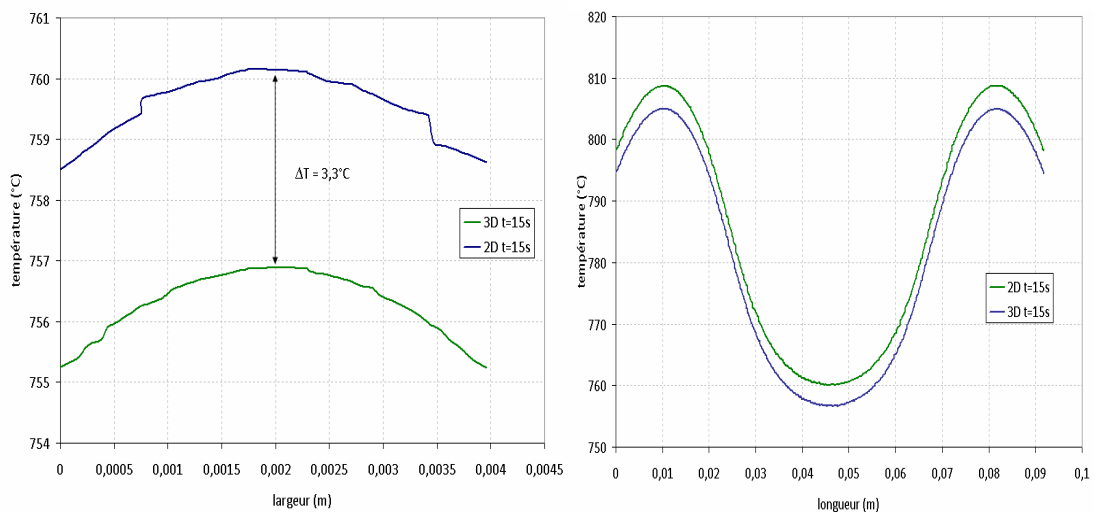


Figure 50 : Profil de température dans le sens de la largeur (gauche) et dans le sens de la longueur (droite) après 15 secondes de refroidissement. En bleu le cas 3D en vert le cas 2D

B. Validation des modélisations, comparaison avec les essais Taboo réels

Dans l'ensemble de ce paragraphe, nous nous employons à montrer la fiabilité du code numérique ; pour cela nous réalisons différentes comparaisons entre des essais Taboo et leur simulation numérique.

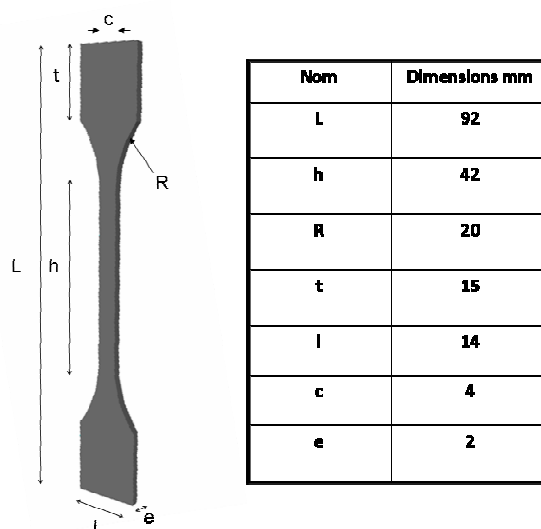


Figure 51: Géométrie des éprouvettes Taboo utilisée pour la validation de la simulation numérique électrique-thermique.

Pour ces essais de validation, une première géométrie est utilisée. Cette géométrie est décrite par le schéma ci-dessous. Le matériau qui la compose est le DP780 ; nous n'avons pas réalisé le même type d'essais sur le ST52 car comme le montrent les données thermophysiques en annexe, les deux nuances sont très proches l'une de l'autre. Nous verrons plus loin que cette géométrie peut être optimisée pour réduire les gradients thermiques.

Considérons d'abord un essai sans traction à l'équilibre thermique (sans variation temporelle de la température). Nous pouvons comparer lors d'un tel essai les champs de température simulé et obtenu expérimentalement. Ceci permet de valider les valeurs de l'émissivité thermique ϵ_r , du coefficient de transfert de chaleur h et de la conductivité électrique σ_e . Le champ thermique mesuré est obtenu par une caméra thermique. Cette caméra permet d'obtenir un champ thermique complet dans une gamme de températures 300°C -950°C (la limite haute peut être plus élevée, mais nous avons délibérément réduit la plage de mesure afin de réduire le bruit à plus faible température). Ces mesures infrarouge sont réalisées sur un échantillon chauffé à 900°C. En l'absence d'utilisation d'un gaz inerte, la surface de l'échantillon s'oxyde, donc l'émissivité peut être considérée constante et égale à 0.8. La température est légèrement inférieure à 900°C au centre de l'échantillon (ceci est probablement dû au filtre gaussien utilisé pour filtrer le signal caméra afin de réduire le bruit de mesure). L'écart de température se réduit à quelques degrés sur l'ensemble de la zone se situant au dessus de la limite de 300°C. Comme le montre la Figure 52, on constate sur cette zone une très bonne prédiction du gradient thermique.

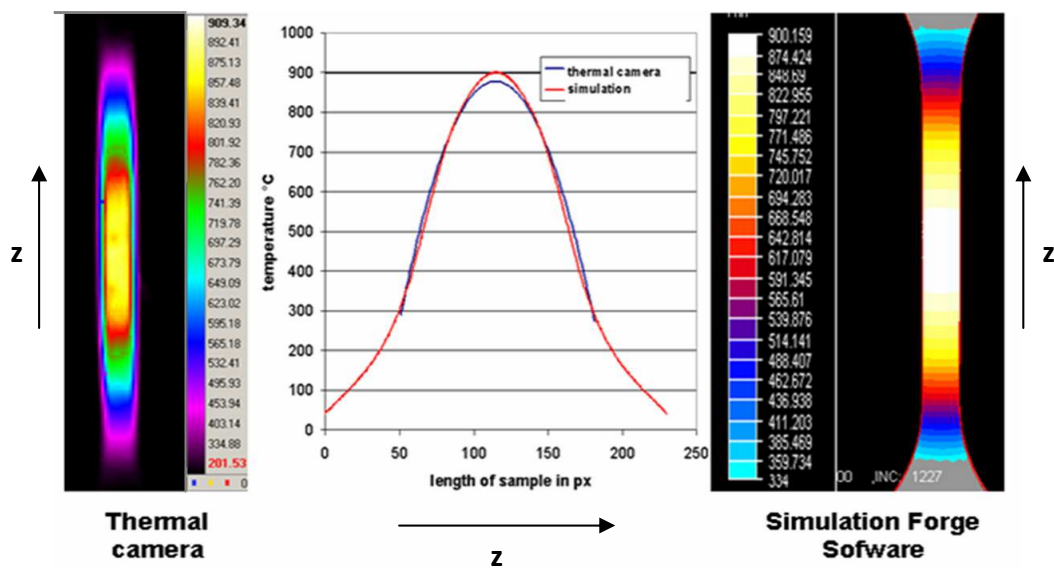


Figure 52: Comparaison entre la mesure caméra thermique et la simulation Forge

Dans un deuxième temps, nous procédons à des comparaisons dans un état hors d'équilibre en vue de déterminer ou valider l'ensemble des propriétés thermo physiques.

On peut distinguer deux périodes durant lesquelles l'éprouvette est hors équilibre :

- Durant la période de montée en température ; durant le chauffage, la température nominale de l'éprouvette, c'est-à-dire, la température au thermocouple de contrôle, est régulée par un algorithme PID aussi bien dans la réalité que dans la simulation. La comparaison des températures au centre est donc sans objet.

Néanmoins, durant cette période nous pouvons comparer les intensités injectées durant la simulation ou durant l'essai Taboo. Ceci permet d'une part de valider le modèle numérique, mais aussi l'ensemble des données thermophysiques du matériau (la conductivité électrique et la chaleur spécifique). Comme le montre la Figure 55, les évolutions de l'intensité au cours du temps sont très proches.

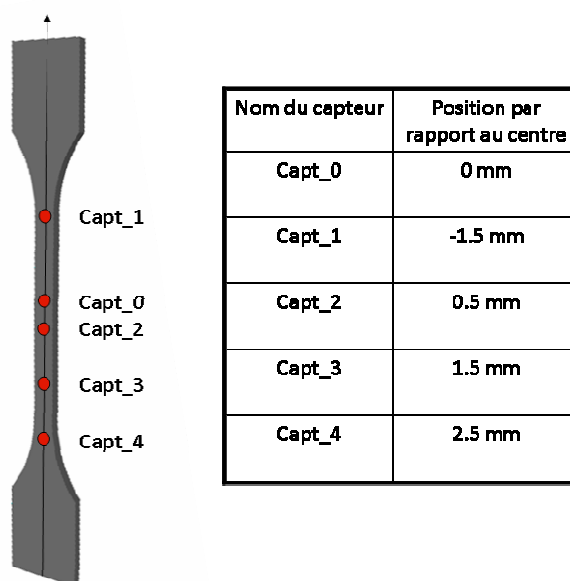


Figure 53: position des capteurs/thermocouples sur une éprouvette Taboo

D'autre part il est aussi possible de suivre les évolutions thermiques en quelques points de l'éprouvette ; pour cela nous avons placé plusieurs thermocouples sur une éprouvette Taboo. La position des thermocouples expérimentaux est décrite à la Figure 53. Durant la simulation numérique, des capteurs ont été placés aux mêmes positions. La Figure 54 montre les évolutions de température en ces points.

- La deuxième période durant laquelle le système est hors équilibre concerne le refroidissement naturel. Durant cette période, la température n'est plus régulée, la densité de courant est ramenée à zéro et le terme d'effet Joule disparaît de l'équation de la chaleur. Dans ce cas, nous pouvons valider l'ensemble des échanges thermiques ainsi que les propriétés thermophysiques entrant dans l'équation de la chaleur. Pour cela, nous comparons l'évolution de la température mesurée par le thermocouple de régulation durant un essai, en incluant la période de refroidissement. Durant la période de chauffage ou de maintien en température un parfait accord est logiquement observé. Durant le refroidissement un bon accord entre les deux températures peut être également observé, sauf autour du changement de phase. Ceci peut être dû à un pas de temps trop élevé pour le calcul au passage du pic du C_p , ou bien à une imprécision des données thermophysiques dans cette gamme de température.

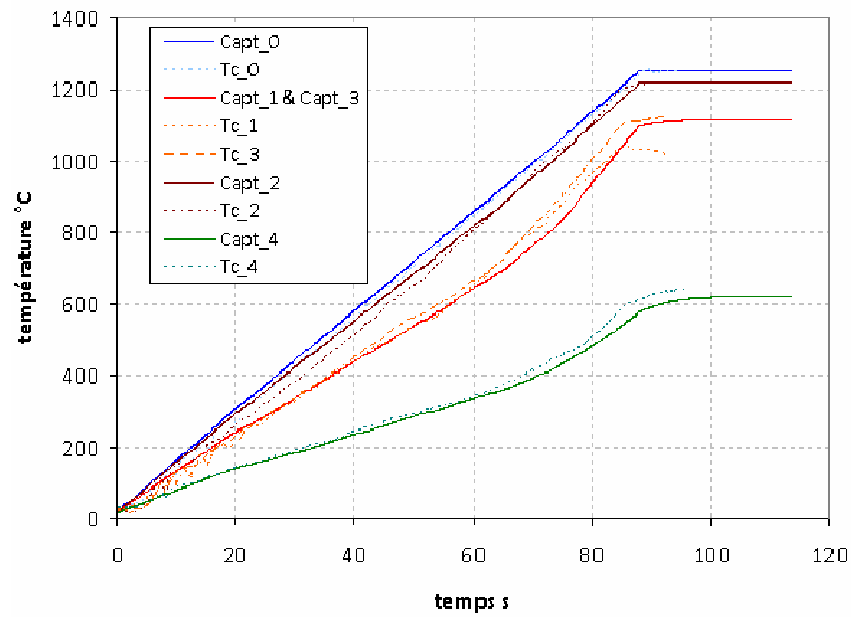


Figure 54: Comparaison entre les mesures thermocouples et les enregistrements capteur lors d'une simulation numérique

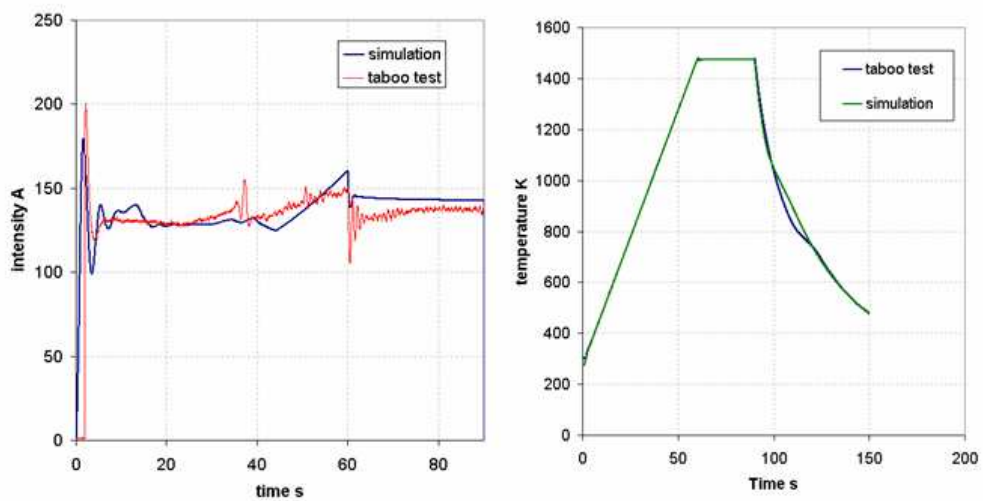


Figure 55: comparaison entre un essai Taboo et une simulation EF Forge: courant injecté (gauche) évolution de la température au centre de l'éprouvette (droite)

Le bon accord trouvé à la fois pour le courant injecté Figure 55 et l'évolution de la température Figure 54 nous permet de valider notre approche numérique 2D modifiée ainsi que les paramètres thermophysiques utilisés.

9.2 Modélisation de l'essai Gleeble

La modélisation de l'essai avait déjà été réalisée par [Brown97], [Norris 99] [Solek05] et plus récemment par [Zhang 10]. Sur Gleeble, la géométrie standard des éprouvettes est cylindrique. Ce choix permet la réalisation de la simulation numérique avec une approche 2D axisymétrique et ce sans modification des conditions aux limites en convection-rayonnement.

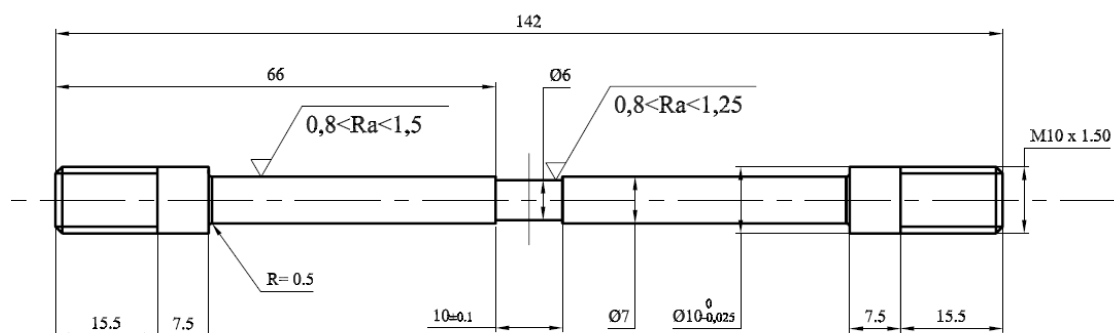


Figure 56: Géométrie de l'éprouvette Gleeble utilisée pour les tests

Si l'on considère un montage Gleeble dans sa globalité, l'éprouvette est serrée dans deux mors en inox, sur ces deux mors un courant alternatif est appliqué via deux électrodes en cuivre.

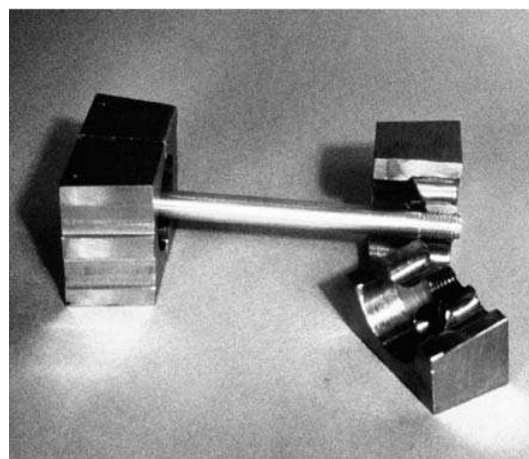
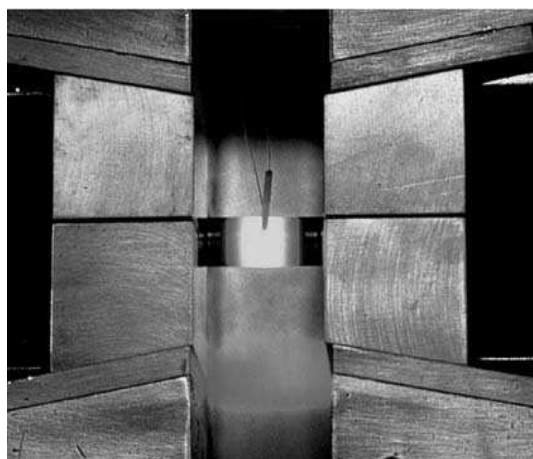


Figure 57: photographies d'un montage Gleeble. On distingue en particulier le thermocouple de contrôle en partie centrale.

Pour réguler la densité de courant qui est injectée, comme lors des essais Taboo, un contrôle de la température couplé à un asservissement par PID est réalisé en continu via un thermocouple soudé sur la partie centrale de l'éprouvette.

Dans le cas présent, en plus du thermocouple de régulation, trois autres thermocouples ont été soudés pour contrôler le gradient thermique le long de l'éprouvette.

Simulation numérique

A la différence des essais Taboo, lors d'un essai Gleeble un courant alternatif $i(t)$ est appliqué aux bornes de l'éprouvette. Afin de simuler ce courant alternatif, nous avons modifié la densité de courant injectée en appliquant l'approximation dite de valeur efficace. Concrètement, il s'agit de l'intensité du courant continu qui dissiperait la même puissance que $i(t)$ à travers une résistance. Mathématiquement cette valeur est donnée par la norme $L2$. La valeur efficace de l'intensité $i(t)$ d'un courant variable de période T se calcule par :

$$I_{eff} = \sqrt{\frac{1}{T} \int_0^T i^2(t) dt} \quad (99)$$

Pour les régimes sinusoïdaux de courant $i(t) = I_{max} \sin(2\pi \frac{t}{T})$ on peut montrer que la valeur efficace est égale à la valeur de crête (valeur maximale, I_{max}) divisée par la racine carrée de 2 :

$$I_{eff} = \frac{I_{max}}{\sqrt{2}} \quad (100)$$

Dans la simulation numérique, nous avons délibérément fait deux approximations. Premièrement nous avons considéré que l'ensemble du montage est axisymétrique, deuxièmement nous avons choisi d'ignorer la présence des électrodes en cuivre, et nous les avons simplement remplacées par des électrodes surfaciques. Néanmoins, nous avons modifié les conditions aux limites pour prendre en compte l'effet des électrodes en cuivre.

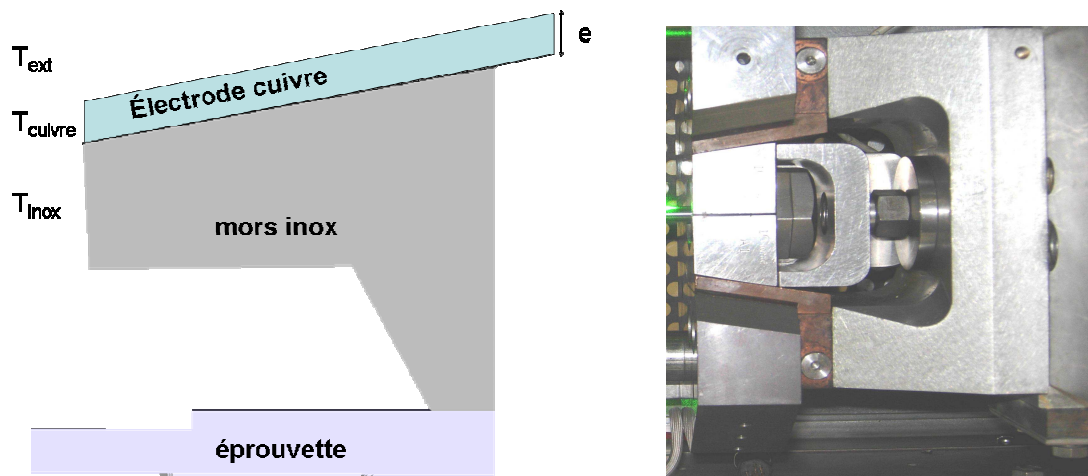


Figure 58: à droite photographie des mors d'une Gleeble, à gauche schéma des mors

Si on considère des conditions stationnaires pour le problème thermique, il est possible d'écrire une égalité entre le flux thermique passant dans l'électrode en cuivre avec le flux thermique des échanges « extérieurs » (ici on considère les échanges avec les boîtes à eau placées sur les électrodes). On peut écrire :

$$\varphi = h(T_{cuivre} - T_{ext}) \quad \text{pour les échanges cuivre – boîte à eau} \quad (101)$$

$\varphi = \frac{k}{e} (T_{inox} - T_{cuivre})$ pour le flux dans l'électrode en cuivre, égal au précédent.

On trouve ainsi que le flux équivalent à la surface des mors a pour expression :

$$\varphi_{eq_inox} = \frac{kh}{he+k} (T_{inox} - T_{ext}) \quad (102)$$

avec

- $h_{Cu/eau} = 3500 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$
- $k_{Cu} = 350 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$
- $e_{Cu} = 4 \text{ mm}$
- $T_{ext} = 20 \text{ °C}$

Dans le reste du problème numérique, le coefficient de transfert thermique est de $10 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$ pour toutes les surfaces libres (échantillon/air ou mors/air), il est de $2500 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$ pour l'échantillon en contact avec les mors. Comme la surface de l'échantillon est oxydée, l'émissivité est supposée égale à 0,85 au cours de toutes les expériences. Au début de la simulation, on suppose que la température est uniforme et égale à 20 °C dans toutes les pièces. L'ensemble des conditions aux limites imposées sur l'éprouvette sont résumées ci-dessous :

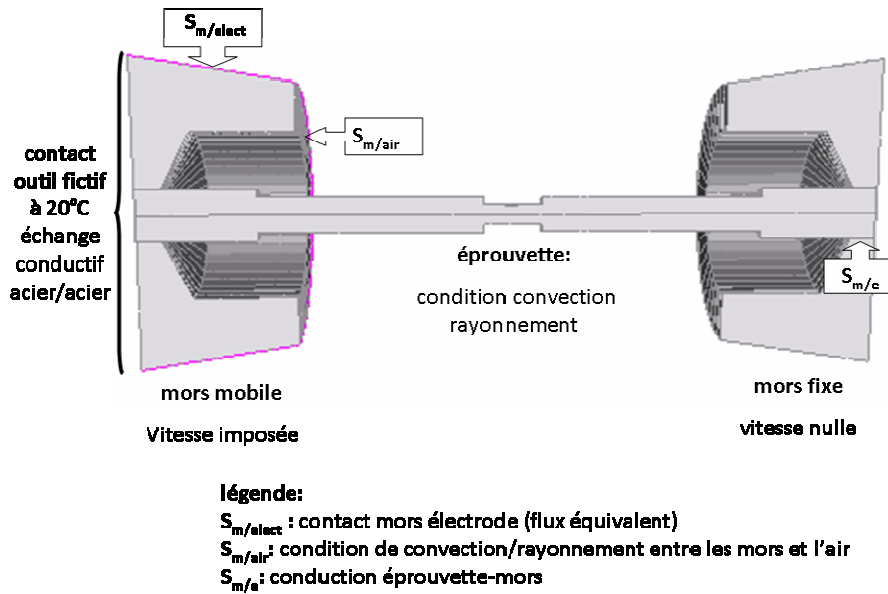


Figure 59 : conditions aux limites imposées sur une éprouvette Gleeble.

En outre, les données utilisées pour les propriétés thermophysiques dépendent de la température. La conductivité électrique a été mesurée par une méthode en quatre points lors d'un essai Taboo.

Afin de valider notre calcul thermique, nous avons placé des capteurs numériques aux mêmes positions que les thermocouples utilisés lors des essais Gleeble.

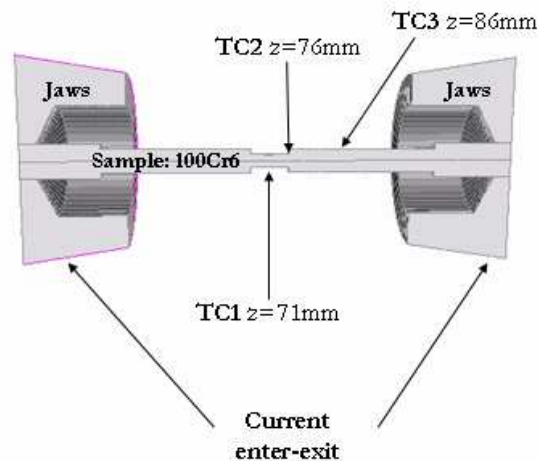


Figure 40: représentation schématique d'une coupe transversale des mors et de l'éprouvette. Tc1 est le thermocouple de régulation situé en surface au centre de l'éprouvette

L'échantillon a été soumis à la consigne de chauffage présentée au paragraphe traitant de la régulation en PID. La distribution des températures est observée et enregistrée en continu au cours de la simulation et de l'essai Gleeble. Ainsi ces températures ont pu être comparées avec les températures mesurées par des thermocouples soudés sur l'éprouvette Gleeble.

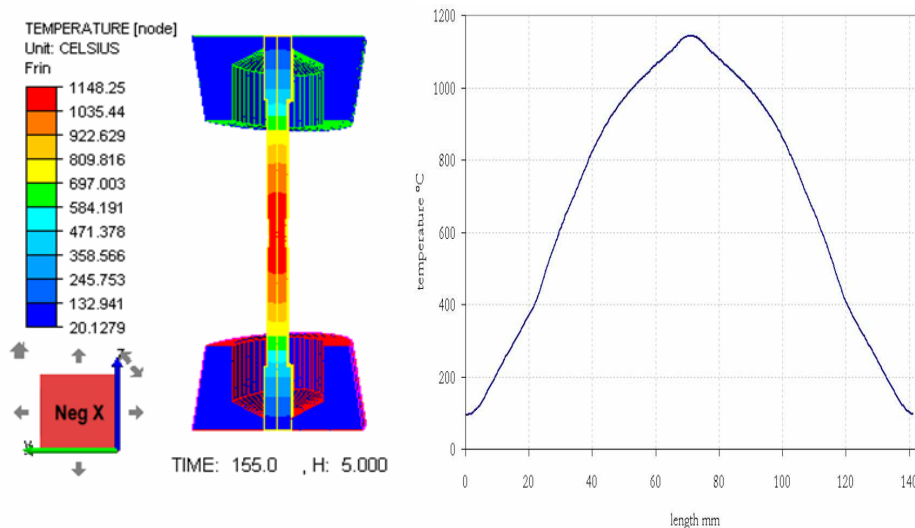


Figure 60 : champ thermique a) et profil thermique longitudinal b) calculés pour une éprouvette Gleeble.

La Figure 61 montre un bon accord entre les températures simulées et les températures mesurées et ceci en particulier dans la zone utile. On remarque une légère

différence entre expérience et simulation pour le thermocouple situé hors de la zone utile de l'échantillon (à 15 mm du centre). Ceci est semble-t-il dû à des problèmes de conductivité thermique à l'intérieur du matériau plutôt qu'à des problèmes de conditions aux limites. En effet, augmenter les échanges thermiques ne change plus fondamentalement le gradient thermique. Néanmoins ce phénomène n'est pas gênant pour identifier les comportements mécaniques par analyse inverse ; en effet cette identification se base sur une mesure locale de déplacement de part et d'autre de la zone utile.

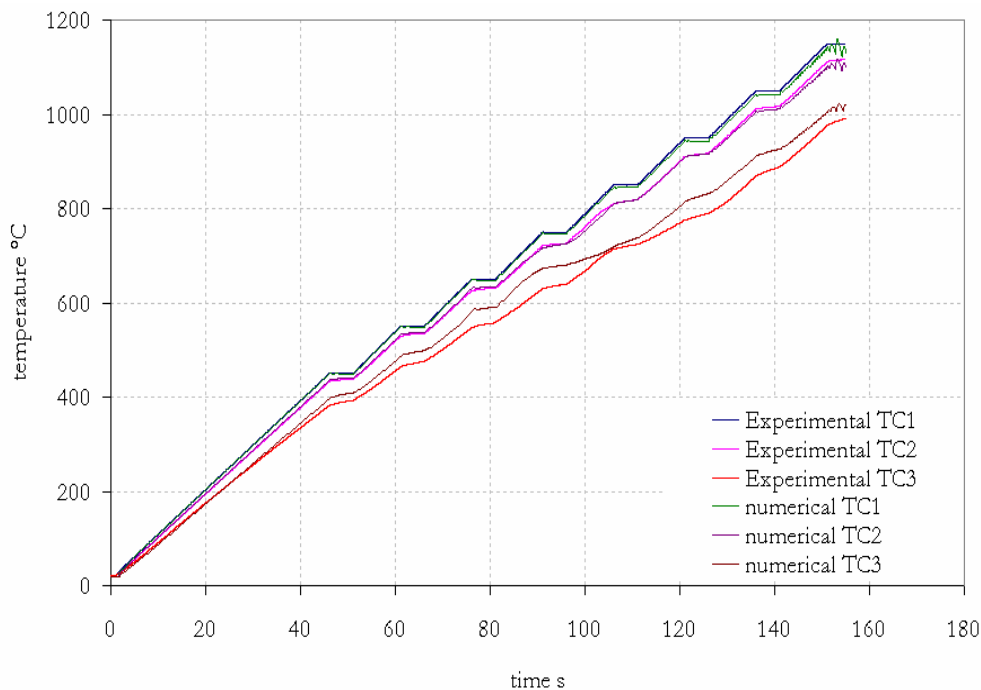


Figure 61: comparaison des mesures de température par thermocouple avec températures calculées aux mêmes positions lors d'une simulation numérique d'un essai Gleeble

10. Aide au design des éprouvettes :

10.1 Vers une géométrie d'éprouvette optimisée

Comme nous verrons dans le chapitre traitant des mesures speckles, lors des essais Gleeble pour mesurer les déplacements sur les échantillons un extensomètre laser est utilisé. Celui-ci mesure un déplacement de part et d'autre de la zone « utile ». En conséquence, si on souhaite que la mesure réalisée entre deux points (mesure type extensomètre) lors des essais ne soit pas une moyenne de valeurs très différentes des déformations réelles, il est préférable que le gradient thermique soit minimisé sur cette zone. Dans cette partie, nous montrons comment notre simulation numérique peut aider à définir une géométrie optimisée pour les éprouvettes.

a) Conditions des simulations numériques :

Les essais et simulations sont réalisés à une température nominale régulée de 1150°C. Après une période de montée en température et d'homogénéisation, l'éprouvette subit un essai de traction à vitesse de traverse constante. La durée de l'essai est de 20s pour un déplacement maximum de 2 mm. La loi de comportement considérée est une loi de type Hansel-Spittel présente dans la base de données du logiciel Forge. Les paramètres utilisés pour loi de comportement sont ceux déjà présents dans cette base de données. Les autres paramètres thermophysiques, excepté la conductivité électrique, sont fournis par Ascometal-Creas et sont résumés en annexe.

$$\bar{\sigma} = 2707 e^{-0.00325T} \bar{\epsilon}^{0.13502} e^{-0.05494/\bar{\epsilon}} \dot{\bar{\epsilon}}^{0.1529}$$

La contrainte équivalente est donnée en MPa, et la température T en K.

b) Différentes géométries :

En se basant sur l'éprouvette standard présentée Figure 56, nous avons modifié soit le rayon de la zone utile, soit la longueur de la zone utile. Les différentes géométries considérées sont présentées ci-dessous.

- Pour les simulations 1 à 3, nous avons conservé la longueur utile de 10 mm, mais nous avons fait varier le rayon, respectivement de 3, 2 et 2.5 mm. La simulation 1 étant considérée comme la simulation de référence
- Pour les simulations 4 et 5, nous avons conservé un rayon de 3 mm, mais nous avons modifié la valeur de la longueur utile, respectivement de 14 et 6 mm.

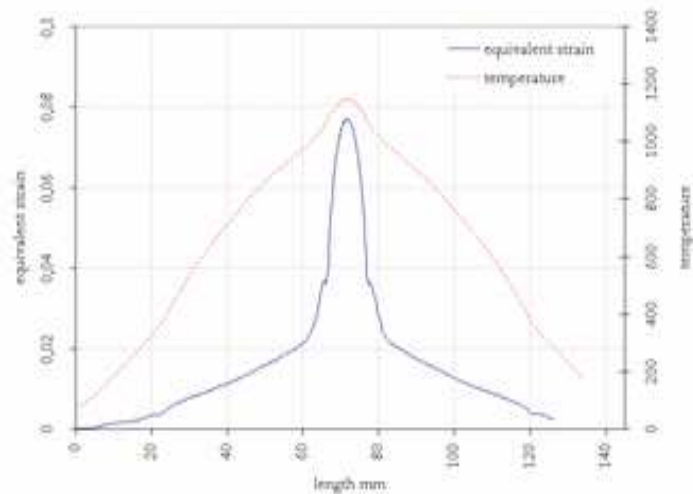
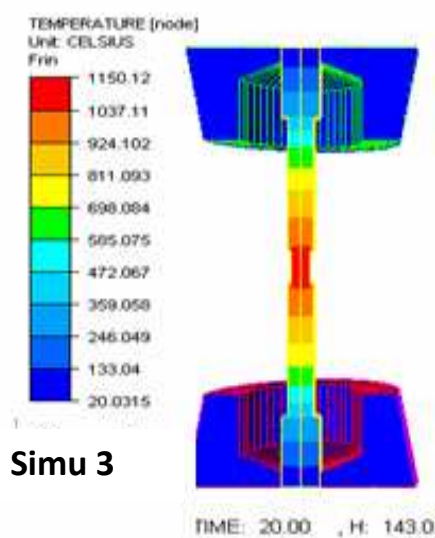
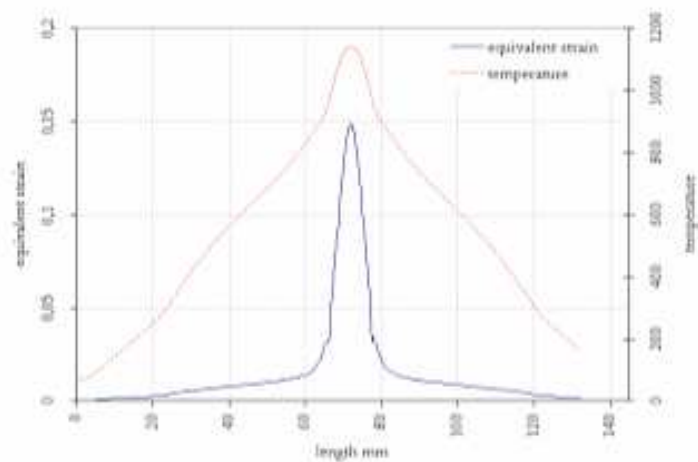
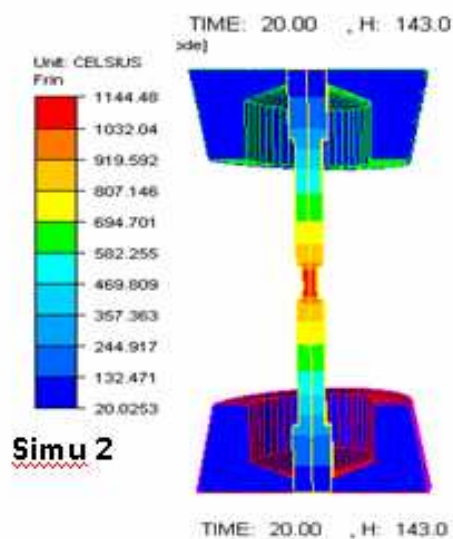
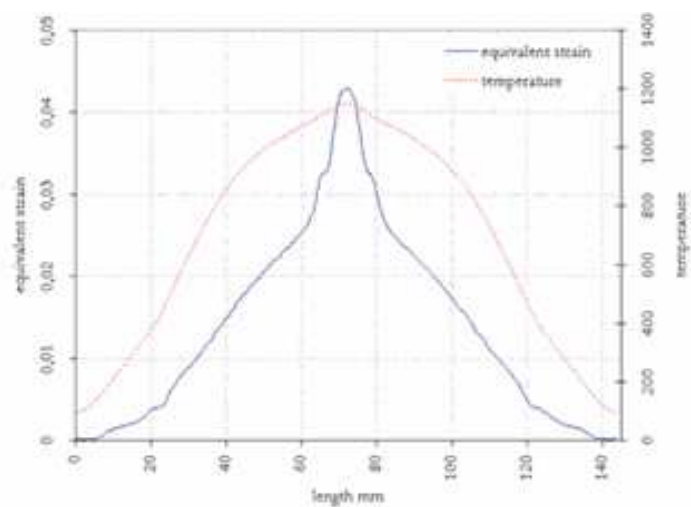
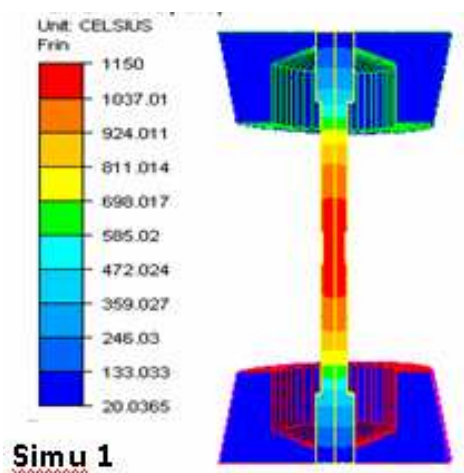
c) Resultats :

L'ensemble de figures présentées ci-dessous résume les résultats obtenus pour les cinq géométries considérées. Une première comparaison des simulations 1 à 3 nous permet de constater que plus le rayon est faible, moins la température est homogène dans la zone utile.

Dans les cas 2 et 3, on a des gradients thermiques importants près du centre, par conséquent la déformation se fait principalement au centre. Dans les autres cas, on déforme significativement en dehors de ces zones.

Mais en contre partie, les déformations ne sont plus homogènes dans ces zones, ce qui peut s'avérer gênant dès lors qu'on moyenne la déformation dans la zone utile. Surtout dans le cas de la mesure des déplacements employée sur Gleeble. Nous verrons cette technique dans le chapitre suivant.

Par conséquent le choix d'un rayon de 3 mm dans la zone utile paraît judicieux. En effet même si cette géométrie ne permet pas de limiter le gradient thermique à la zone utile afin d'y concentrer la déformation, elle permet de limiter le gradient de déformation.



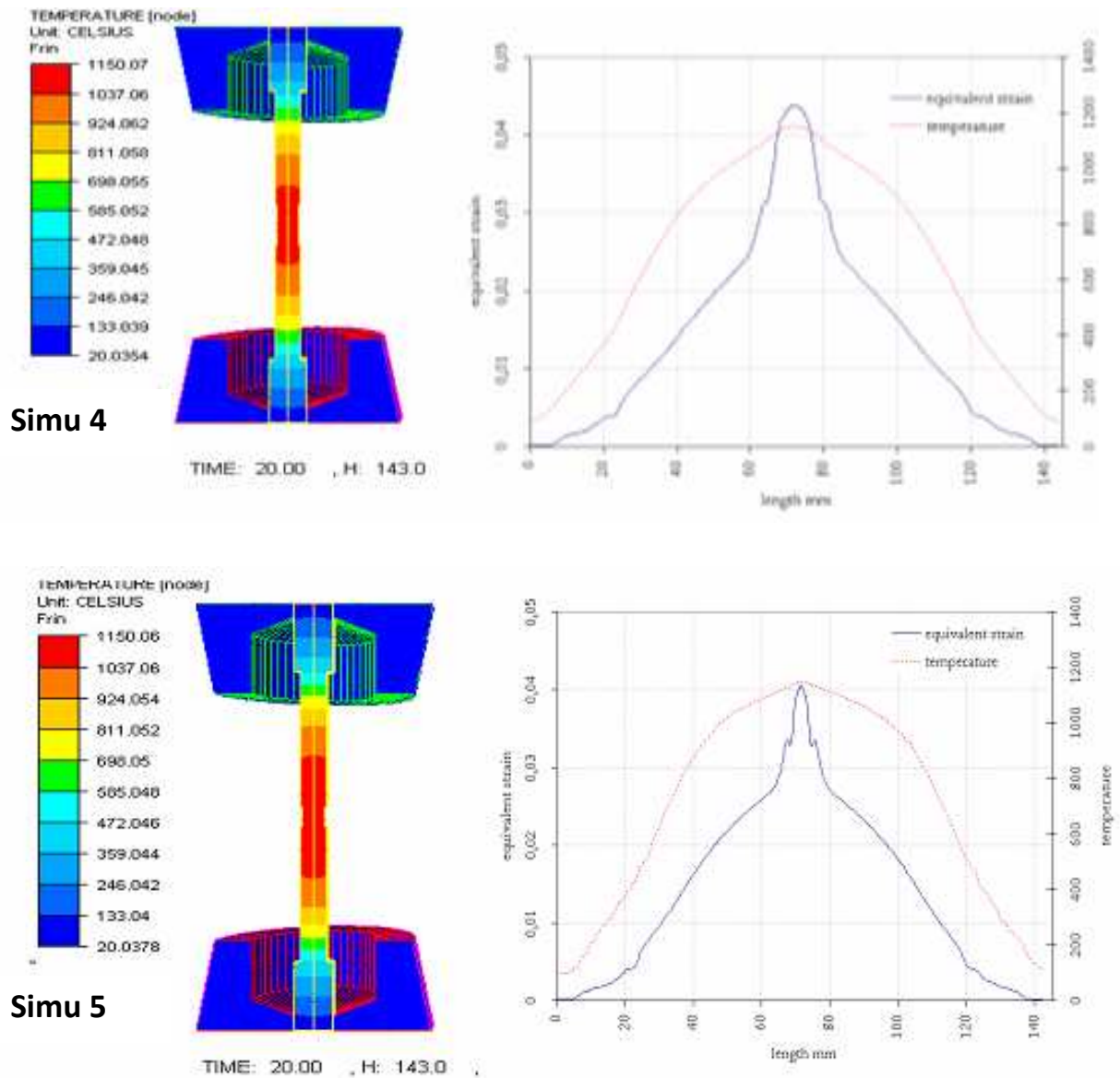


Figure 62 : (a gauche) champ de déformations, (au centre champ) de température, et le profil longitudinal des deux champs précédents (à droite)

En comparant maintenant les simulations 1, 4 et 5, nous constatons que la simulation 5 (zone utile 6 mm) est celle qui présente le moins de gradient thermique le long de la zone utile. La géométrie 4 (zone utile de 14 mm) n'offre aucun avantage par rapport à la géométrie 1 (Figure 63).

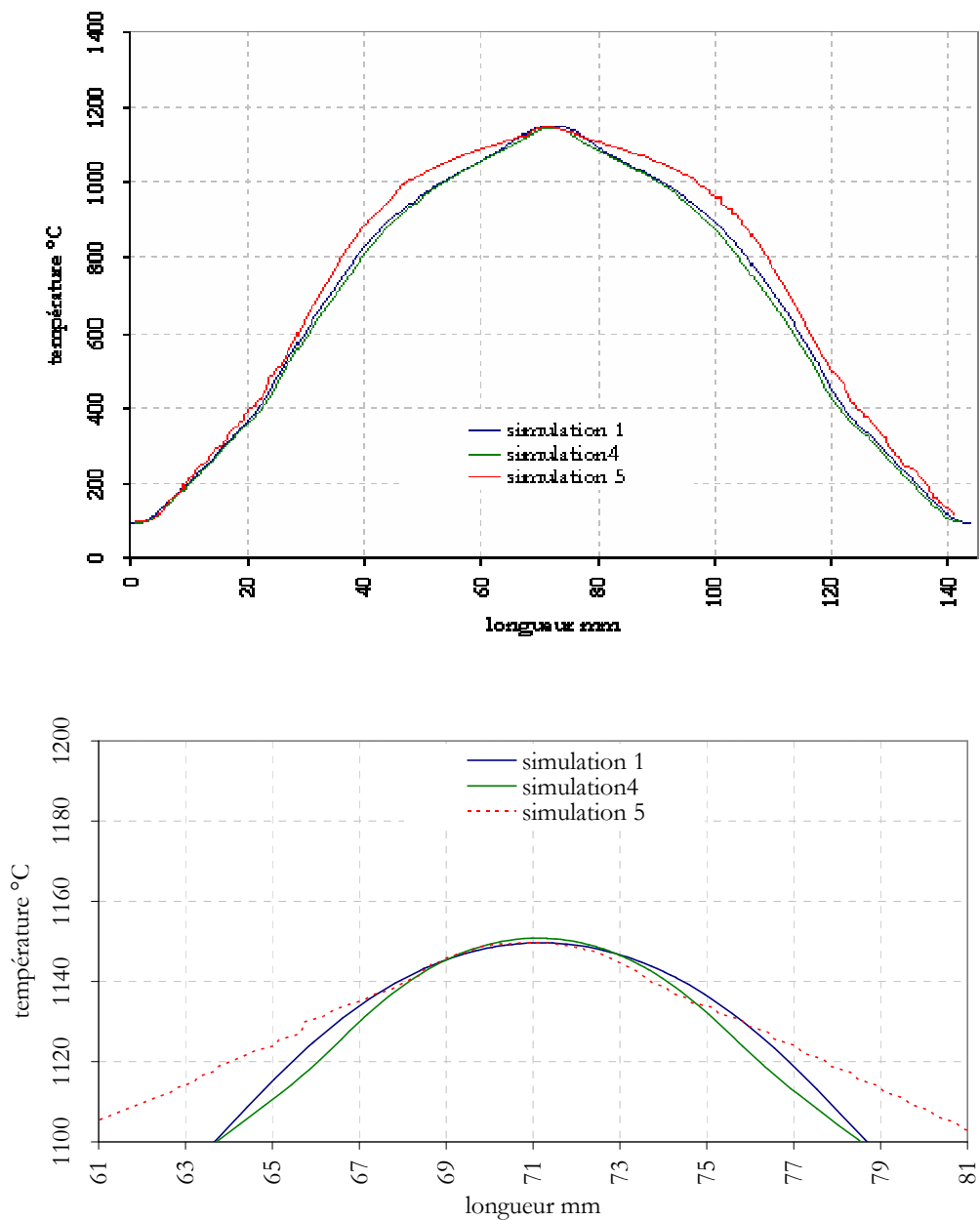


Figure 63 : distribution de température le long d'une éprouvette Gleeble, pour les 3 géométries retenues (zoom central image du bas)

Maintenant pour sélectionner la meilleure géométrie, nous avons comparé la déformation équivalente, et comme le montre la Figure 64, même si les courbes sont très ressemblantes, du fait que sur la géométrie la zone utile soit plus faible la déformation y est plus homogène. Par conséquent la géométrie 5 est semble-t-il celle présentant le meilleur compromis.

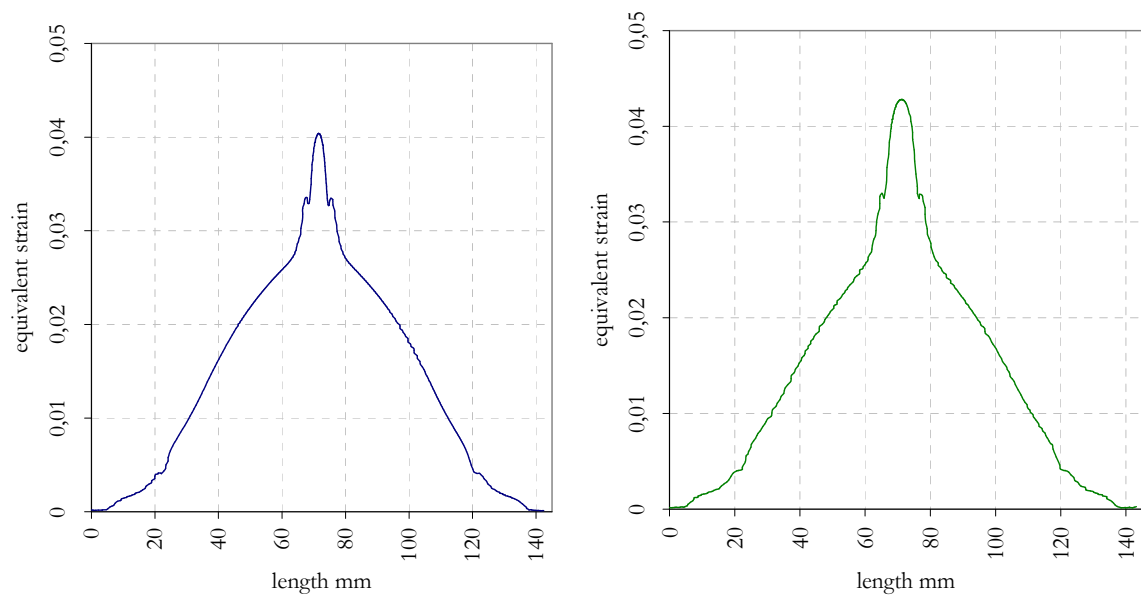


Figure 64 : distribution de la déformation équivalente le long d'une éprouvette Gleeble, à droite la géométrie 5 et à gauche la géométrie 1

10.2 Vers une géométrie d'éprouvette optimisée pour Taboo

Comme nous le verrons dans le chapitre suivant, l'utilisation d'une méthode de mesure de champs permettant de connaître précisément le champ de déplacement pourrait permettre de s'affranchir d'un bon contrôle du gradient thermique. Néanmoins le fait d'avoir un fort gradient thermique dans la zone utile n'est pas idéal pour réaliser des essais. En effet si ce gradient est trop important on localise rapidement la déformation. Cette simulation a principalement été développée pour permettre l'analyse des essais avec l'existence du gradient thermique. Néanmoins elle a aussi été utilisée pour le dimensionnement des éprouvettes. En effet il est préférable de limiter le gradient de température dans la zone utile.

Les résultats présentés précédemment ont été obtenus pour une éprouvette dont les dimensions sont les suivantes : longueur 92 mm largeur de la zone utile 4 mm et épaisseur 2 mm (Figure 51). Ces calculs ont été réalisés pour la nuance DP780.

Les paramètres modifiables pour la géométrie se limitent à :

- La longueur L de l'éprouvette,
- la largeur c de la zone utile.

Pour encadrer les valeurs, nous avons d'abord pris en compte les contraintes imposées par la machine. La longueur maximale autorisée sur Taboo est de 92mm (il s'agit de l'écartement maximal entre le mors fixe et le mors mobile, quand le mors mobile est en butée basse et la largeur des éprouvettes ne peut dépasser 14 mm (prise des mors).

Si on considère deux longueurs d'éprouvette, à savoir 60 et 92 mm (mais de même largeur, 8 mm), en regardant la Figure 65 on voit très clairement que l'éprouvette la plus longue est celle qui présente le gradient thermique le plus faible sur une zone plus étendue.

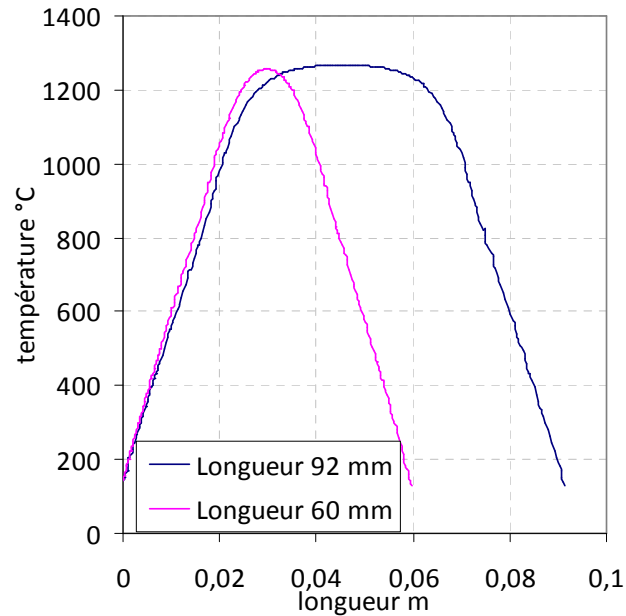


Figure 65 : distribution de la température le long d'une éprouvette Taboo, de largeur 8mm

En ne retenant qu'une seule longueur, nous pouvons nous intéresser à l'influence de la largeur. Nous considérons donc deux éprouvettes de 92 mm de long et 4 ou 8 mm de large.

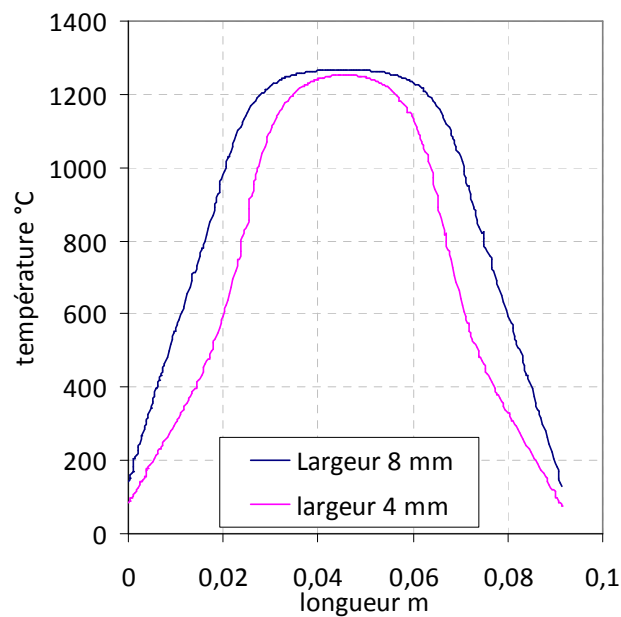


Figure 66 : distribution de la température le long d'une éprouvette Taboo, de longueur 92mm

Donc pour minimiser le gradient thermique dans la longueur de l'éprouvette, les résultats précédents montrent qu'il est préférable d'avoir une éprouvette la plus longue et large possible (92 x 8 mm). Néanmoins une section de 8 mm entraîne un gradient thermique de près de 20°C dans la largeur (5°C pour la largeur de 4mm), ce qui pourrait entraîner des déformations non homogènes sur la section.

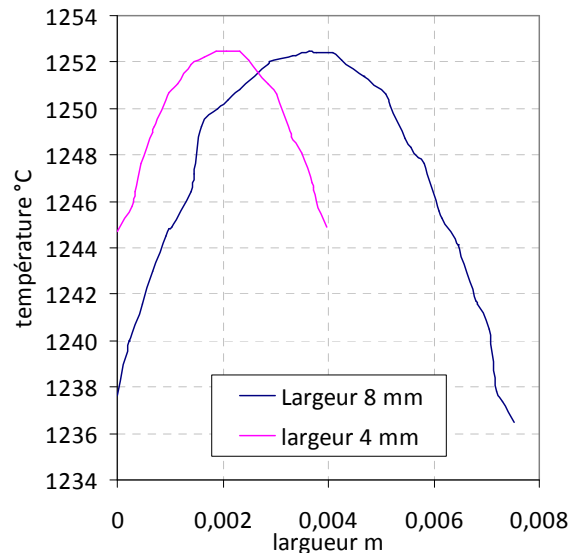


Figure 67 : distribution de la température dans la largeur d'une éprouvette Taboo

Donc le choix d'une géométrie intermédiaire (longueur 92 et largeur 6) nous paraît réunir le plus d'avantages, c'est-à-dire une large zone de mesure sur laquelle le gradient thermique n'est pas très important, un assez faible gradient dans la largeur (ce qui nous permet de supposer que les déformations seront homogènes sur une section) et une section suffisamment grande pour avoir des valeurs de force suffisantes à des températures supérieures à 1300°C. Les premiers essais de traction réalisés à 1200°C sur le DP780, ont montré une force maximum de 180N environ pour des éprouvettes de 4mm de large.

11. Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons présenté des instruments nécessaires à la caractérisation rhéologique à chaud. D'une part, deux machines de traction avec chauffage par effet Joule permettant de reproduire les chemins de sollicitation thermique et mécanique rencontrés lors des procédés de solidification. Comme nous avons pu le voir, l'important gradient thermique présent sur les éprouvettes est certainement le principal inconvénient sur ce type de machine.

Afin de mieux maîtriser et de mieux comprendre ce gradient thermique nous avons adapté à notre problématique une simulation couplée électrique-thermique et mécanique. Cette simulation, qui a été validée sur des cas numériques et à l'aide de mesures expérimentales, nous a dans un premier temps permis de comprendre la distribution thermique et ainsi de proposer une géométrie optimisée.

D'autre part, cette simulation numérique s'avèrera particulièrement intéressante pour l'analyse des essais Taboo et Gleeble.

Enfin cette simulation numérique nous a permis de montrer les limites d'une analyse basée sur une déformation contenue uniquement à l'intérieur d'une « zone utile ». C'est, en partie, pour cette raison que nous avons décidé de développer une mesure locale du déplacement. Cette technique est présentée dans le chapitre suivant.

Bibliographie

- [Arbaoui07] : L. Arbaoui, (2007).Modelisation numérique du procédé de soudage USW, Rapport mastère spécialisée, *Mines ParisTech, CEMEF*.
- [Aliaga00] : C. Aliaga, (2000), simulation numérique par éléments finis en 3d du comportement thermomécanique au cours du traitement thermique d'aciers: application à la trempe de pièces forgées ou coulées., thèse de doctorat, *ENSMP- CEMEF*.
- [Ashcroft76] : N. Ashcroft, N. Mermin, (1976), Solid state physics , *E. Science*.
- [Barnes47] : B. Barnes, W. Forsythe, E. Aadam, (1947), The total emissivity of various materials at 100-500°C , *Journal of the Optical Society of America*, **37**, pp.804-807.
- [Bauer03] : Bauer, W., Grafen, W. and Rink, M. (2003).Spectral emissivities of heat-treated steel surfaces. Ripple, D., eds.*TEMPERATURE: ITS MEASUREMENT AND CONTROL IN SCIENCE AND INDUSTRY, VOL 7, PTS 1 AND 2*, 8th International Temperature Symposium, CHICAGO, IL, OCT 21-24, 2002, 807-812.
- [Brown97] : S. Brown, J. James, J. Spittle, (1997), A 3D numerical model of temperature-time characteristics of specimens tested on a Gleeble thermomechanical simulator , *modelling and simulation in materials science and engineering*, **5**, pp.539.
- [Carslaw 59] H. S. Carslaw , J. C. Jaeger, (1959) Conduction of Heat in Solids, Oxford University Press.

- [Chaboche89] J.L. Chaboche, (1989), Constitutive equations for cyclic plasticity and cyclic viscoplasticity, *International Journal of plasticity*, **5**, p247
- [Chenot02] : Chenot J.L., Fourment L., Mocellin K., "Numerical treatment of contact and friction in FE simulation of forming processes", *J. Mater. Process. Technol.*, 125-126, 2002, p. 45-52.
- [Davisson24] : C. Davisson, J. Weeks, (1924), the relation between the total thermal emissive power of a metal and its electrical resistivity , *Journal of the Optical Society of America*, **8**, pp.581-605.
- [Delobelle84] P. Delobelle, C. Oytana, (1984), Experimental study of the flow rules of a 316 stainless steel at high and low flow stress, *Nuclear Engineering and Design*, **83**, p333
- [Diop09] : M. Diop, (2009), Contribution à l'étude mécanique et électrique du contact localisé : Adaptation de la nanoindentation à la micro-insertion, thèse de doctorat, *Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint Etienne*.
- [Drude00] : P. Drude, (1900) *Zur Elektronentheorie der Metalle*. In: *Annalen der Physik*. **306**, 566–613.
- [Favennec03] : Y. Favennec, V. Labbé, F. Bay, (2003), Induction heating processes optimization a general optimal control approach , *Journal of computational physics*, **187**, pp.68.
- [Fortin85]: M. Fortin, A. Fortin (1985) "Newer end newer elements for incompressible flows". *Finite Element in Fluids*, **6**, 171.
- [Feulvarch06] : E. Feulvarch, P. Rugeon, P. Carre, V. Robin, G. Sibilia, J. Bergheau, (2006), Resistance spot welding process: Experimental and numerical modeling of the weld growth mechanisms with consideration of contact conditions , *Numerical Heat Transfert Part A*, **49**, pp.345-367.
- [Hayek07] : M. Hayek, J. Vasely, M. Cieslar, (2007), Precision of

electrical resistivity measurements , *Materias Science and Engineering A*, **462**, pp.339.

- [Kobayashi99] : M. Kobayashi, A. Ono, M. Otsuki, H. Sakate, F. Sakuma, (1999), A database of normal spectral emissivities of metals at high temperatures , *International Journal of Thermophysics*, **20**, pp.299-308.
- [Kobayashi99 a] : M. Kobayashi, M. Otsuki, H. Sakate, F. Sakuma, A. Ono, (1999), System for measuring the spectral distribution of normal emissivity of metals with direct current heating , *International Journal of Thermophysics*, **20**, pp.289-298.
- [Kohlrausch00] : F. Kohlrausch, (1900), Über den stationären temperaturzustand eines elektrisch geheiztenleiters , *Annalen der Physik*, **1**, pp.132-158.
- [Lund52] : H. Lund, L. Ward, (1952), The spectral emissivity of Iron, Cobalt and nickel , *Proceedings of the Physical Society of London*, **65**, pp.535-540.
- [Mocellin99]: K. Mocellin, (1999) Contribution à la simulation numérique tridimensionnelle du forgeage à chaud: étude du contact et calcul multigrille. thèse de doctorat, *Mines-ParisTech*
- [Monnier06] : A. Monnier, (2006), Etude théorique et modélisation du soudage par résistance de matériaux de contact pour appareillage électrique, thèse de doctorat, *LGEP*.
- [Norris99] : S. Norris, I. Wilson, (1999), Application of 3D Numerical Modelling for Thermal Profile Optimization on the Gleeble Thermomechanical Simulator , *modelling and simulation in materials science and engineering*, **7**, pp.297.
- [Paloposki05]: T. Paloposki, L. Liedquist, (2005), Steel emissivity at high temperatures, *VTT research notes*, **2299**

- [Parker65]: W.J. Parker, G.L. Abbott, (1965), Theoretical and experimental studies of the total emittance of metals, Symposium on Thermal Radiation of Solids, Ed by S. Katzoff, pp11
- [Perchat00] : E. Perchat, (2000), Mini-élément et factorisations incomplètes pour la parallélisation d'un solveur de stokes 2D. Application au forgeage. thèse de doctorat, *Mines-ParisTech*.
- [Pradille10] : C. Pradille, M. Katia, F. Bay (2010). An experimental study to determine electrical contact resistance. *Proceedings of the 56 IEEE Holm Conference on Electrical Contacts*, 1 - 5
- [Roger79] : C. Roger, S. Yen, K. Ramanathan, (1979), Temperature variation of metal hemispherical emissivity of stainless steel AISi-304 , *Journal of the Optical Society of America*, **69**, pp.1384-1390.
- [Sibilia04] : G. Sibilia, P. Rogeon, P. Paillard, G. Saindrenan, J. Soigneux, P. Lemasson, D. Carron, (2004), Experimental validation of an electro-thermo-metallurgical predictive model in resistance spot welding , *Journal de Physique IV*, **120**, pp.689-696.
- [Sievers78] : A. Sievers, (1978), Thermal radiation from metal surfaces , *Journal of the Optical Society of America*, **68**, pp.1505-1516.
- [Solek08] : Solek, K. and Lukaszek-Solek, A. (2008).Analysis of the heating process and development of microstructure suitable for thixforming of steel.*International Journal of material forming*, 1015.
- [Solek05] : Solek, K., Mitura, Z. and Kuziak, R. (2005).A numerical model of the resistance heating system for material tests on a Gleeble simulator.*Computational Fluid and Solid Mechanics* Barthe, K., eds.*3rd Conference on computational Fluid and solid mechanics*, MIT, Boston, USA, 1001.

- [Song05] : Q. Song, W. Zhang, N. Bay, (2005), An experimental study determines the electrical contact resistanc in resistance welding , *Welding Journal*, **supplement**, pp.73.
- [Taylor51] : J. Taylor, (1951), the variation with wavelength of the spectral emissivity of Iron and Molybdenum , *Journal of the Optical Society of America*, **42**, pp.33.
- [Wiedemann53]: G. Wiedemann, R. Franz, (1853) Über die Wärme-Leitungsfähigkeit der Metalle, *Annalen der Physik und Chemie*, **8**, 139
- [Zhang10] : C. Zhang, M. Bellet, M. Bobadilla, H. Shen, B. liu, (2010), A coupled electrical-thermal-mechanical modeling of Gleeble tensile tests for UHS steel at a high Temperature, *Metallurgical and Materials Transactions A*,**41**, 2304-2017.

Chapitre 4 : Mesure de déformation par corrélation d'images de speckles laser

Une part importante du projet Cracracks (c'est-à-dire un Work Package sur quatre) consiste à caractériser le comportement rhéologique de différentes nuances d'aciers, et ce dans le but d'obtenir des lois de comportement utilisables dans des simulations telles que celles réalisées avec Thercast. En effet, pour des simulations précises, les données rhéologiques doivent être obtenues dans des conditions thermo-mécaniques proches de celles rencontrées lors de la solidification. Une même question s'est rapidement posée chez l'ensemble des partenaires du projet en charge de la caractérisation mécanique : comment mesurer des déplacements à très haute température et pour de faibles déformations sur des équipements complexes ?

Dans ce chapitre, nous présenterons une méthode de mesure de déplacement par speckles laser. Cette technique a été mise en place au Cemef sur la machine Taboo ainsi qu'au sein du groupe Ascométal sur une machine Gleeble™[Gleeble].

La technique a été déclinée en deux variantes qui sont légèrement différentes sur le concept et le montage, mais ne diffèrent nullement par leur philosophie. En fait, dans les deux cas, la mesure de déplacement se base sur une figure interférométrique produite par la rugosité des éprouvettes.

Dans ce chapitre, nous reviendrons dans une brève étude bibliographique sur les différentes méthodes existantes, puis nous détaillerons les choix qui ont été faits en fonction des contraintes liées aux machines d'essais ainsi qu'aux besoins auxquels ces techniques de mesures doivent répondre.

1. Mesure de champs de déplacement, étude des méthodes existantes

L'identification du comportement mécanique est un enjeu majeur pour améliorer la qualité des prédictions numériques. Cette connaissance nécessite l'utilisation de moyens expérimentaux puissants. Pour cela les jauges de déformation, les extensomètres mécaniques et autres capteurs sont des moyens fiables et faciles à mettre en œuvre, mais ils restent ponctuels et nécessitent un contact avec les échantillons. A côté des techniques de mesures extensométriques classiques existent des moyens optiques de mesures de déformation. Certains systèmes permettent de suivre au cours d'un essai la distance entre deux ou quatre cibles placées sur une éprouvette (marquage noir par exemple). Le déplacement peut être mesuré en temps réel et est obtenu par un alignement des axes optiques des cibles. En fait, le système de mesure calcule le déplacement relatif du centre de gravité de chaque tache [Iris]. Ces mesures extensométriques peuvent être complétées par des mesures de champ de déplacement. Ce type de mesure trouve toute son importance lorsque le champ de déplacement devient hétérogène (gradient de température, zone de striction, amorçage de fissure...). De nombreuses techniques permettent de réaliser ces mesures de champ. En conséquence dans les paragraphes suivants nous réaliserons un panorama rapide des techniques existantes. Ces différentes techniques s'appliquent à des champs d'application différents et sont présentées plus en détail dans [Hild99] ou plus récemment dans [grédiac11], ainsi que dans [Polster69]. Concernant ces méthodes, on distinguera les méthodes basées sur des interférences de rayons lumineux monochromatiques ou cohérents (laser) de celles utilisant une lumière blanche (source incohérente). L'ensemble des propriétés physiques et optiques qui peuvent être associées aux techniques présentées ci-dessous sont décrites dans [Goodman85].

De nombreuses méthodes optiques peuvent être rencontrées dans la littérature. Dans cette partie nous détaillerons l'ensemble des méthodes existantes, puis dans une dernière partie nous reviendrons sur notre problématique ainsi que sur les avantages et les inconvénients de chacune des méthodes présentées ci-dessous.

1.1 Les méthodes de moiré et les méthodes de grilles

A. La méthode de moiré et moiré interférométrique

La technique de moiré n'est pas une technique de mesure sans contact puisqu'elle implique de déposer un réseau constitué de traits parallèles opaques et transparents sur la surface de l'échantillon [Theocaris69], [Patorski86]. Un autre réseau identique sert de référence. Ce réseau de référence peut simplement être projeté en l'illuminant avec des sources de lumière. Un déplacement provoque un moiré, c'est-à-dire une distribution de franges claires et sombres. Les franges sont alors analysées par le biais d'un interféromètre moiré [Post00]. Par étude de ces interfranges, il est possible de remonter au déplacement. L'information extraite d'une méthode de moiré est équivalente à celle obtenue à l'aide d'interférogrammes lumineux classiques (i.e détection de franges).

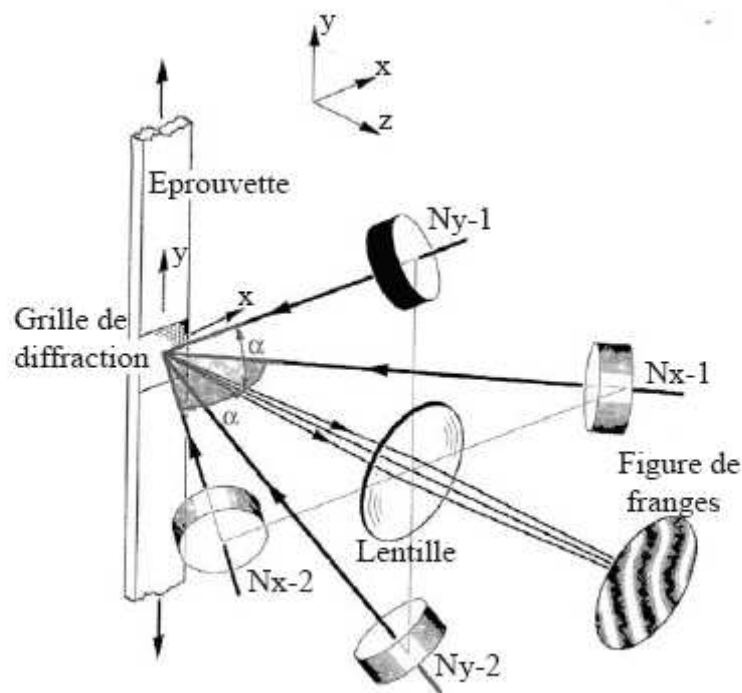


Figure 68 : principe des moirés [Triconnet 07]

Cette méthode peut offrir des précisions allant jusqu'à quelques nanomètres ; elle est donc particulièrement adaptée aux mesures en très petites déformations. Le principal problème avec cette méthode est l'existence de bruit dans les mesures, ce qui conduit à des niveaux de bruit très importants sur les champs résultants. De plus, la qualité des différents composants optiques formant l'interféromètre, et la difficulté d'alignement des faisceaux lumineux, font de cette technique aux excellentes performances, une technique difficile à mettre en place.

B. Les réseaux de grilles ou de cercles

Tout comme la méthode de moiré, il s'agit d'une méthode nécessitant une préparation de la surface des éprouvettes. Il s'agit d'une méthode très répandue, son utilisation est particulièrement fréquente en emboutissage. Cette technique a été fréquemment utilisée au CEMEF [Knockaert01]. Le principe de cette méthode est assez simple, il s'agit de déposer sur la surface à étudier un réseau formé de cercles ou de carrés [Surrel00], [Avril02] [Badulescu09]. Lors de la déformation de la surface du matériau, le réseau suit le déplacement. Ainsi la mesure du champ de déformation ou de déplacement résulte de la mesure de la taille du réseau déformé et d'une comparaison avec le réseau initial.

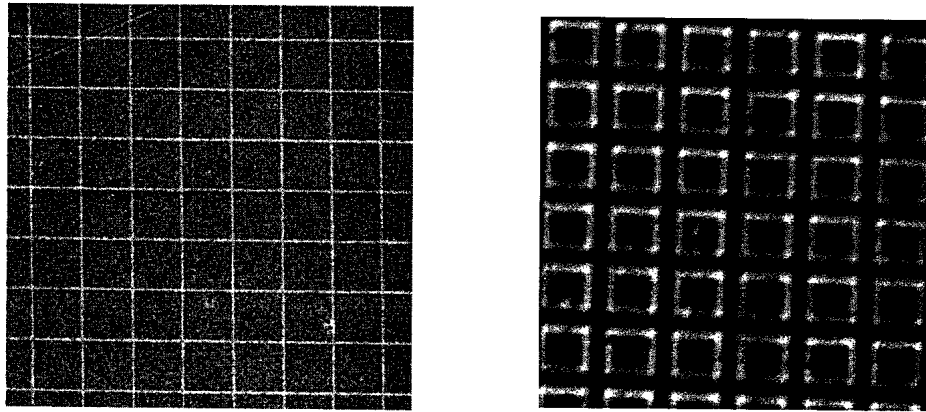


Figure 69 : à gauche, grille obtenue par peinture, à droite obtenue par électrogravage [Vautrin02]

Cette technique présente deux inconvénients, tout d'abord une forte sensibilité aux mouvements hors plan. C'est-à-dire que la méthode nécessite que le plan du capteur et la plan du réseau soient parfaitement parallèles. L'autre limitation vient du pas des grilles utilisées, c'est ce pas qui définit la résolution de la méthode. Enfin ce qui est à retenir c'est la capacité des grilles à résister aux hautes températures.

1.2 Les techniques de corrélation d'images

Ces techniques permettent la détermination des champs de déplacement et de déformation à la surface d'un objet par comparaison de deux images : une image de référence de l'objet à l'état initial et une image du même objet après avoir subi une transformation mécanique (simple translation ou déformation) [Sutton00].

A. La mesure de champ de déplacement en lumière blanche

Cette technique a été développée dans les années 80 [Peters82], [Chu83] ; elle est basée sur l'intercorrélation d'images numériques. Le principe de cette technique consiste à comparer deux motifs grâce aux variations de texture de surface de l'objet observé. Pour cela on utilise un motif aléatoire. Le champ de déplacement plan est obtenu par intercorrélation d'une image de référence avec une image déformée [Chen93]. Le principal avantage de cette méthode réside dans le peu de matériel nécessaire à sa mise en œuvre, c'est-à-dire une caméra CCD, une carte d'acquisition, un PC et une source lumineuse.

L'aspect aléatoire de la texture de la surface des éprouvettes est utilisé comme mouchetis aléatoire. De cette technique découle l'utilisation des mouchetis de peinture vue précédemment. Ces mouchetis ont été introduits dans le cas où la surface de l'éprouvette n'offrait pas un contraste suffisant issu de la seule texture.

Lors des essais en lumière blanche la surface de l'éprouvette est suivie et enregistrée durant la durée d'un essai mécanique à l'aide de la caméra CCD. Ce sont ces images qui, une fois couplées à un algorithme de corrélation, servent à calculer les déplacements à la surface de l'éprouvette.

Cette méthode présente de nombreux avantages, comme la mesure sub-pixel selon les algorithmes utilisés, la surface de l'échantillon n'a pas forcément besoin d'une préparation particulière, la résolution spatiale de la mesure n'est pas limitée par une distance entre points comme dans le cas des grilles. On peut y trouver certains inconvénients, le nombre de point à traiter est limité par la taille du capteur CCD, les variations de texture de surface dues à l'application d'une force peuvent modifier l'image et donc la mesure, et enfin un mauvais alignement du système d'observation par rapport à l'objet peut provoquer des erreurs.

B. Mouchetis de peinture

Dans le même esprit que la technique présentée au paragraphe précédent, la méthode consiste à déposer un mouchetis de peinture aléatoire sur l'éprouvette et à en suivre le déplacement au cours du temps. Cette technique est utilisée dès lors que le contraste à la surface de l'éprouvette n'est pas suffisant. L'utilisation d'une peinture noire et blanche permet de l'augmenter artificiellement. Comme dans le cas précédent pour déterminer un déplacement, l'utilisation d'un algorithme de corrélation d'images permet de comparer une image à un instant $t_0 + \Delta t$ avec une image à un instant t_0 . L'avantage d'une telle méthode réside dans le fait que les algorithmes de corrélation sont plus sensibles aux mouchetis aléatoires qu'aux réseaux structurés. Elle offre ainsi de meilleurs résultats que dans le cas de réseaux ou de grilles.

1.3 L'holographie et l'holographie interférométrique

L'holographie fut développée par Gabor en 1949 [Gabor49] ce qui lui a valu un prix Nobel. Les principes de l'holographie sont présentés par [Brandt69] et ceux de l'holographie interférométrique sont exposés dans [Duffy72]. Une plaque photosensible reçoit simultanément la lumière émise et diffusée par un objet et celle provenant directement de la source lumineuse. Les deux ondes provenant de la même source sont cohérentes et interfèrent en formant des franges lorsqu'elles se rencontrent sur la plaque holographique. Ce sont ces franges appelées hologramme qui caractérisent la forme et la texture de l'objet. L'hologramme constitue une image virtuelle en trois dimensions de l'objet de référence. En remplaçant l'hologramme dans la position exacte qu'il occupait au début de l'enregistrement, l'onde reconstruite sera une réplique de l'onde de l'objet initial si celui-ci n'a pas bougé. Dans le cas contraire, il n'y aura plus coïncidence parfaite entre l'objet éclairé à l'instant t et l'hologramme initial. Ceci a pour effet de créer des franges. Ces franges présentent un maximum à l'endroit où l'écart entre l'objet initial et l'objet déformé est un multiple de la longueur d'onde.

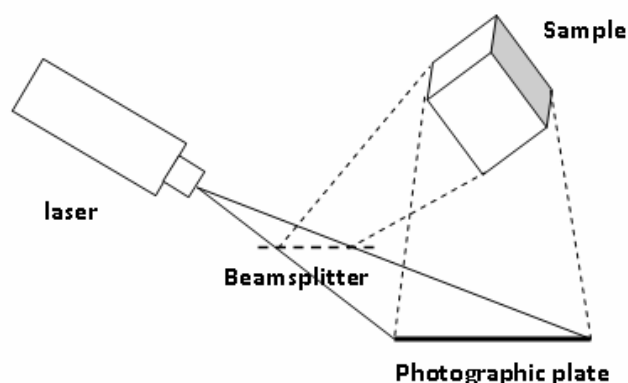


Figure 70 : principe de l'holographie

Le principal problème de l'interférométrie holographie (hormis la mise en place des montages) est, aussi étrange que cela puisse paraître, dû au progrès technique. En effet, l'holographie se pratiquait avec des émulsions photographiques classiques. L'apparition des capteurs CCD a diminué les performances de cette méthode.

1.4 Les techniques basées sur les speckles laser

A. Les speckles laser ou granularité laser

De par son caractère interférentiel un speckle laser ne se différencie pas d'une figure d'interférence qui aurait été produite par une multitude de trous d'Young placés côte à côte. Initialement les speckles ont été observés en astrophysique, où ils sont provoqués par des mouvements turbulents de l'atmosphère [Petrov82]. Les speckles qui sont souvent considérés comme un bruit optique se forment dès lors qu'une surface rugueuse est éclairée par une source monochromatique.

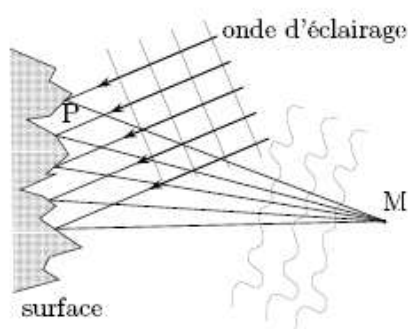


Figure 71 : diffusion d'une source de lumière monochromatique par les rugosités de surface

Le speckle (ou granularité laser) est un bruit spatial présent dans l'intensité lumineuse diffusée par une surface matérielle rugueuse lorsque celle-ci est éclairée par une source monochromatique. Le speckle donne un aspect granulaire à cette surface.

La Figure 71 décrit le principe de formation des speckles. Au niveau microscopique, une surface présente en général des irrégularités d'amplitude supérieure ou égale à la longueur d'onde de la lumière visible. Si cette rugosité est éclairée par une lumière monochromatique, la lumière diffusée subit un déphasage aléatoire à cause de la différence de chemin optique. En un point quelconque d'observation M, les amplitudes des contributions venant de tous les points P de la surface vont s'additionner. L'amplitude de l'onde en M sera la superposition des contributions de toutes les sources élémentaires. Cette différence de phase provoque des interférences constructives (en opposition de phase) ou destructives (en phase) (cf Figure 72).

Chaque speckle peut être vu comme un interférogramme dont l'intensité est donnée par la relation :

$$I(x, y) = I_0(x, y) + I_m \cos[\varphi(x, y)] \quad (2)$$

I_0, I_m et φ varient de façon aléatoire entre chaque speckle.

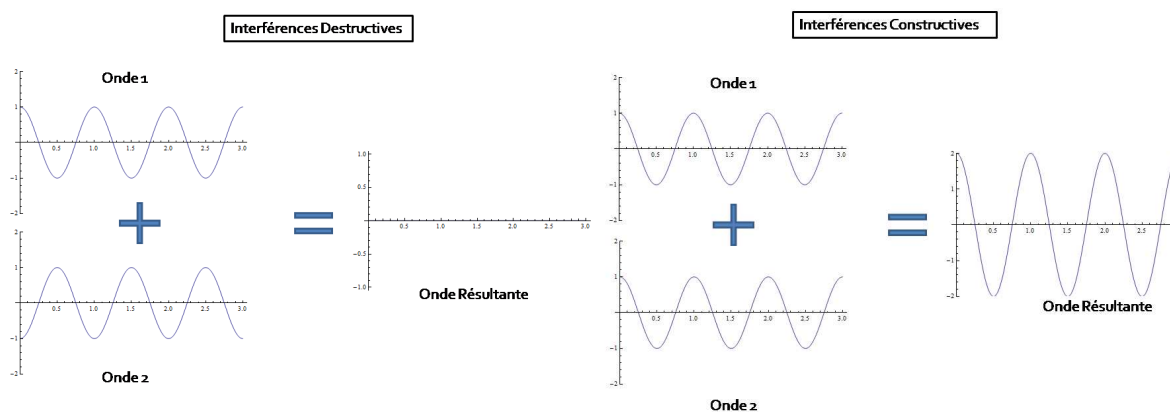


Figure 72 : notion d'interférences destructives et constructives

Ces interférences génèrent une distribution statistique spatiale ressemblant à un mouchetis que l'on appelle speckle (Figure 73). Du fait de leurs propriétés, les speckles sont à un instant donné la signature optique d'une surface.

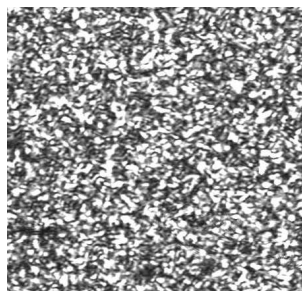


Figure 73 : exemple d'une figure de speckles

B. Corrélation de speckles

Cette méthode s'avère être très proche de la méthode de corrélation en lumière blanche. Quand une surface diffusante est éclairée par un laser, elle apparaît donc revêtue d'un motif aléatoire de grains lumineux. Si la surface est animée d'un mouvement de translation, les speckles suivent le même mouvement, ils peuvent donc constituer un marquage de la surface. Cela peut servir à mesurer un déplacement par une méthode de corrélation. Cette caractéristique des speckles a entraîné leur utilisation pour des mesures de déplacement lors d'essais mécaniques [Chiang97], [Sjödahl97], [Sjödahl98] ou [Huang07].

C. Interférométrie speckles, EPSI et SPSI

L'interférométrie speckles est une technique d'analyse introduite initialement par A. Labeyrie [Labeyrie70] dans les années 70 et utilisée en astronomie pour obtenir de l'information à haute résolution angulaire en dépit de la turbulence terrestre.

a) EPSI, Electronic Speckle Pattern Interferometry

Il s'agit d'une méthode s'approchant de l'holographie [Molin04]. En effet on mesure le déphasage entre deux ondes. Pour cela deux voies peuvent être utilisées :

La première consiste à diviser un le rayon émis en deux, une partie sert à éclairer la surface de l'objet l'autre sert de faisceau de référence. Le rayon servant à éclairer la surface est alors réfléchi et enregistré. Les ondes de réflexion interfèrent avec celles du faisceau de référence. La figure d'interférence est acquise par une caméra CCD. La corrélation entre cette image et la suivante donne des informations sur le déplacement parallèle à l'axe optique (c'est-à-dire suivant l'axe x). L'EPSI est une méthode dite hors plan.

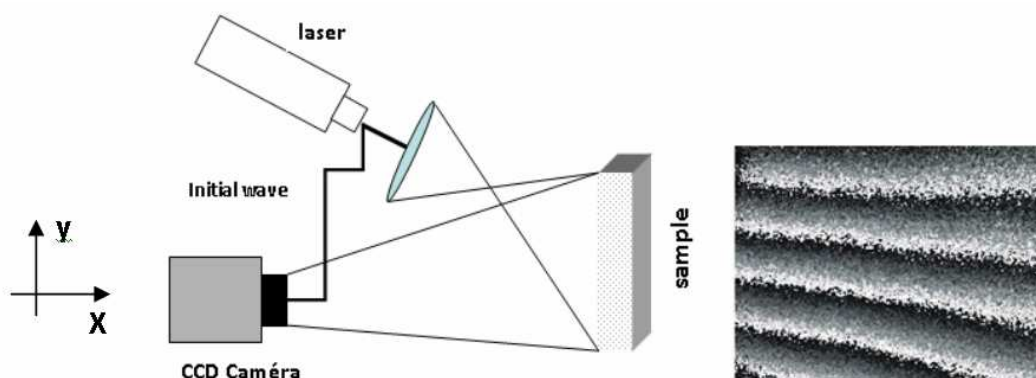


Figure 74 : mesure hors plan par interférométrie speckles, figure d'interférométrie à droite [Sjödahl98].

Pour mesurer des déplacements dans le plan, l'objet étudié est éclairé par deux côtés, grâce à deux faisceaux lumineux [Lokberg85]. Généralement, ces deux faisceaux proviennent de la même source. Les directions des faisceaux définissent un plan. Le système est sensible aux déplacements situés sur la perpendiculaire de la bissectrice des directions d'éclairage.

Pour ces mesures aucun faisceau de référence n'est nécessaire. On utilise seulement les interférences entre les deux ondes d'éclairage.

b) SPSI, La shearographie ou Speckle Pattern Shearing Interferometry.

Cette méthode utilise également le laser [Hung75]. Elle permet de mesurer le gradient de déplacement en surface. L'objet étudié est éclairé à l'aide d'un laser ; celui-ci se reflète sur la surface de l'objet et est renvoyé sur le capteur CCD. Entre le capteur CCD et l'objet est placé, à mi hauteur du CCD, un dispositif optique tel qu'un biprisme ou une lame de verre mince qui cisaille les images. Les deux images interfèrent, et par comparaison des deux états on peut visualiser le déplacement dans la direction cisailée.

Les méthodes utilisant l'interférométrie speckle (EPSI ou SPSI) sont plus robustes que l'holographie, et plus flexibles que l'interférométrie de réseau. Par contre les montages sont coûteux et complexes à mettre en place. Quant aux signaux, ils sont souvent bruités, ce qui rend difficile l'analyse.

2. Problématique haute température : Choix d'un nouveau moyen de mesure

Les techniques présentées ci-dessus comme l'interférométrie holographique, l'interférométrie speckles EPSI permettent des mesures de déplacement à l'échelle microscopique (entre 0,1 et 10 μm). En conséquence ces méthodes sont difficilement applicables à des essais de traction, a contrario d'autres méthodes qui concernent des mesures de déplacement à l'échelle mésoscopique, donc plus applicables à notre problématique.

L'ordre de grandeur du déplacement à mesurer n'est pas l'unique problème. En effet lors du choix de la technique, la principale difficulté, dans notre cas, provient des conditions thermiques qui sont imposées sur les échantillons lors des essais. En effet, trouver des paramètres rhéologiques dans des conditions de soudage ou de solidification signifie mesurer des déplacements pour des températures supérieures à 1100°C. Donc le problème est de trouver une méthode de mesure applicable à ces températures.

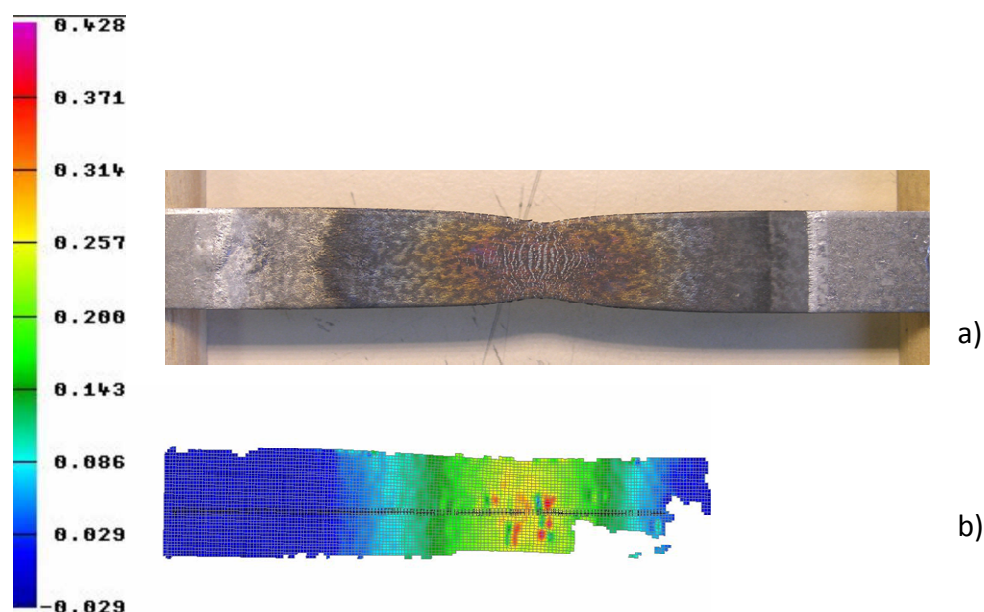


Figure 75 : qualité d'un mouchetis obtenu par électrogravage après un essai de traction à 900°C a). Cette dégradation du mouchetis se traduit par des problèmes d'analyse et donc par des aberrations sur le champ de déformation b) (analyse réalisée à l'aide du logiciel de corrélation d'images Aramis [Aramis])

Les techniques optiques basées sur des mouchetis ou des motifs directement accolés sur les éprouvettes deviennent inutilisables elles aussi à ces températures. En effet, qu'il s'agisse de mouchetis peinture, ou réalisés par électrogravage (Figure 75), ou des techniques basées sur des méthodes de grilles ou de moirés, ces techniques deviennent inutilisables au-delà de 900°C (et ce même pour les peintures sensées supporter les hautes températures [Dahan08]). La Figure 75 montre très bien l'impossibilité d'utiliser de telles techniques pour des températures élevées. On remarque que sur l'éprouvette présentée après un essai de 5min à une température de 900°C, le gravage s'est craquelé, ce qui a pour conséquence de donner dans ces zones des mesures de déformation totalement erronées. Pour réaliser des mesures non intrusives, il est donc particulièrement intéressant d'utiliser un éclairage extérieur et de créer le mouchetis à partir de cet éclairage.

Des études récentes se sont intéressées à ces mesures hautes températures. [Völk02] utilise une méthode optique de détection de contours qui lui permet de connaître l'allongement d'une éprouvette en se basant sur le déplacement de petits marqueurs usinés sur la surface de l'éprouvette. Cette méthode de type extensomètre ne permet pas d'envisager des mesures de champ. [Pan10] a développé une méthode permettant la mesure de champ. Cette méthode repose sur l'utilisation d'un mouchetis « peinture » à base d'oxyde de cobalt. Ce type de mouchetis permet de s'affranchir des problèmes liés à la dégradation haute température des peintures. Pour s'affranchir des problèmes liés au rayonnement haute température, il utilise des lumières LED de couleur bleu. [Awander00] avait lui proposé une méthode encore différente, il se base sur une technique de speckles laser dit subjectif et connaissant le déplacement de deux taches sur une éprouvette, il connaît ainsi l'allongement durant un essai de traction.

Les solutions les plus envisageables sont donc les méthodes de type champ de déplacement en lumière blanche ou des méthodes de granularité laser. Mais pour des températures avoisinant les 1200°C, un autre problème apparaît. En effet, à ces températures, comme le montre la loi de Planck (Figure 76), le rayonnement dans le rouge devient important et sature très rapidement les capteurs CCD.

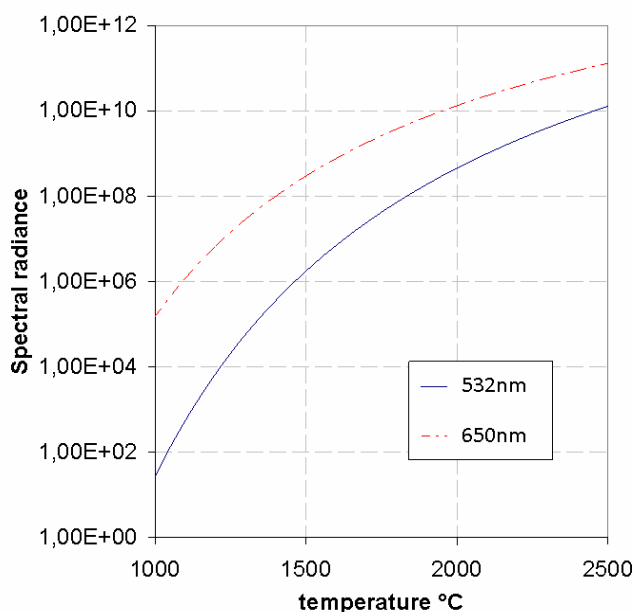


Figure 76: variation en fonction de la température de l'émissivité spectrale pour deux longueurs d'onde. Emissivité $\epsilon=1$

Une variante de la mesure de champ en lumière blanche peut alors être envisagée. Elle consiste à éclairer l'aspect aléatoire de la texture des éprouvettes par une source de lumière monochromatique verte ($\lambda=532\text{nm}$) permettant l'utilisation d'un filtre. Ainsi on s'affranchit du rayonnement rouge des éprouvettes incandescentes. Ce montage pourrait être considéré comme une « mesure de champ en lumière monochromatique ». Néanmoins, dans un tel dispositif le fait d'utiliser une lumière monochromatique cohérente entraîne la formation de speckles laser. Lors de l'observation deux phénomènes sont donc superposés.

L'autre méthode consiste à utiliser uniquement une technique de granulosité laser tout en conservant l'utilisation d'un filtre optique pour supprimer le rayonnement.

Plus concrètement, deux montages différents ont été mis en place, l'un au Cemef, l'autre chez Ascometal. Dans le cas du montage réalisé au Cemef, les speckles sont filmés sur la surface de l'éprouvette et par conséquent couplés à une mesure de champ en lumière monochromatique, tandis que le montage réalisé chez Ascometal exploite uniquement le principe des speckles objectifs (ou de granulosité laser).

Nous reviendrons sur les techniques et les deux montages dans un paragraphe suivant.

3. Mesure du déplacement

3.1 Principe de la corrélation d'images

La technique de corrélation d'images est une méthode optique sans contact de mesure de champs cinématiques 2D. Elle consiste à mettre en correspondance deux images numériques de la surface observée à deux états distincts de déformation, un état dit de référence et un état dit déformé.

En pratique, on souhaite connaître le champ de déplacement qui s'est produit entre deux instants auxquels ont été acquises deux images. En se référant à la Figure 77, le déplacement d'un point d'une image est associé au déplacement du centre d'un carré d'analyse (ou sub-image), illustré par le cadre de couleur. L'image initiale étant divisée en plusieurs sub-images, nous reviendrons sur cette technique utilisée pour la mesure de champ un peu plus loin dans ce chapitre. Les images sont discrétisées spatialement par un capteur CCD, ainsi pour chaque pixel on obtient une valeur de niveau de gris. Le principe de la corrélation consiste à apparier le motif correspondant à la zone d'étude dans les deux images afin de pouvoir déterminer le déplacement du centre de cette zone d'étude (Figure 77).

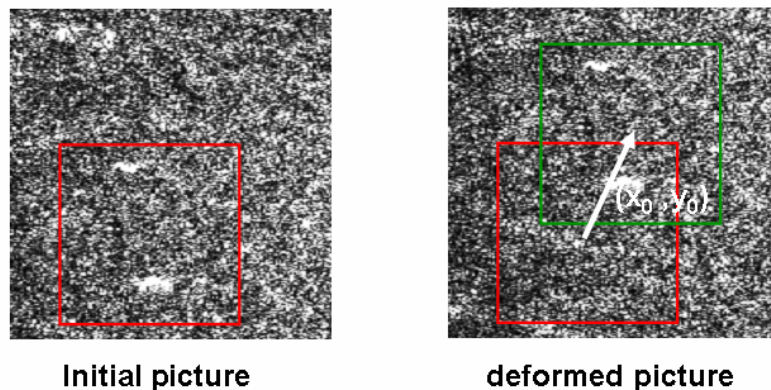


Figure 77 : zones d'études sur une image de référence et sur une image déformée

Le déplacement entre les deux images s'apparente au décalage d'un signal bidimensionnel continu ; en effet chaque image correspond à une variation de l'intensité lumineuse dans le plan observé. La corrélation d'images repose sur deux hypothèses majeures.

- La première hypothèse est la conservation des niveaux de gris entre l'image initiale et l'image déformée. Il faut donc s'assurer que les mécanismes responsables de la déformation du matériau n'entraînent pas de modification de contraste qui provoquerait un risque de décorrélation.

- La seconde hypothèse est illustrée par la Figure 78 et repose sur la nécessité d'avoir un contraste dans l'image et que ce contraste soit unique au voisinage de la zone d'analyse.

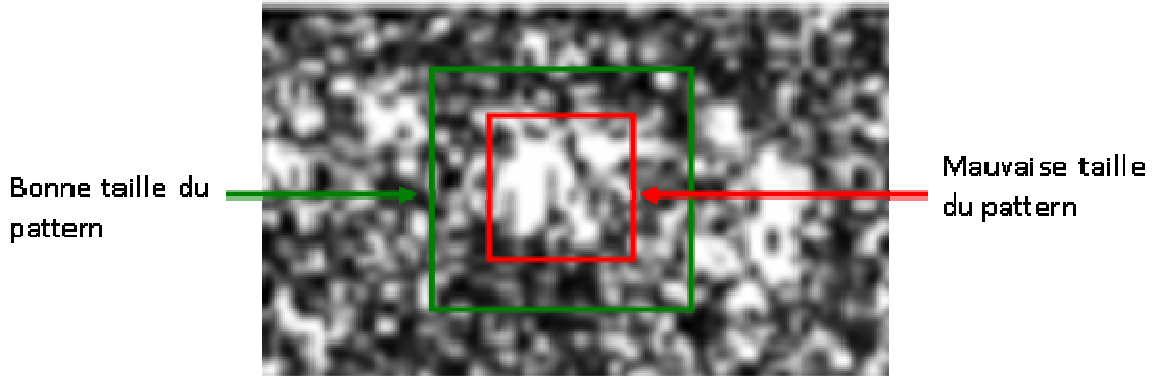


Figure 78 : notion de taille correcte de pattern (zone d'étude)

L'intercorrélation est la technique classiquement utilisée pour l'analyse de déplacement entre deux images. Elle consiste à trouver les vraisemblances existantes entre deux images (deux signaux). Cette méthode classiquement utilisée en analyse du signal permet de remonter à un décalage entre deux signaux. Il correspond dans notre problématique au déplacement à caractériser.

Avant d'introduire plus précisément le concept de corrélation d'images, il est important d'introduire le concept de transformée de Fourier. On appelle transformée de Fourier d'une fonction f de deux variables spatiales x et y , la fonction notée :

$$TF\{f(x, y)\} = F(u, v) = \iint f(x, y) e^{-2i\pi(ux+vy)} dx dy \quad (103)$$

Dans le domaine du traitement de signal, on travaille souvent avec des systèmes discrets. On introduit donc la transformée de Fourier discrète :

$$F(U, V) = \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{m=0}^{M-1} f(x, y) e^{\frac{2i\pi m}{M}} e^{\frac{2i\pi n}{N}} \text{ avec } m = 0, \dots, M-1 \text{ et } n = 0, \dots, N-1 \quad (104)$$

La forme discrète de la transformée de Fourier est utile dans notre cas. En effet lorsqu'on travaille avec des images, la distribution de niveau de gris correspond à une fonction discrète. Pour augmenter la vitesse de calcul on utilise la transformée de Fourier rapide TFR.

3.2 Interpectre de deux signaux, cas bidimensionnel

Les calculs permettant de déterminer le décalage entre deux images peuvent être conduits directement dans l'espace de Fourier. Le fait de calculer dans l'espace de Fourier

nous permet de réaliser des calculs spectraux et d'utiliser l'interspectre pour calculer les déplacements. Cette méthode est déjà utilisée en astrophysique au département Hippolyte Fizeau de l'université de Nice Sophia Antipolis pour mesurer les déplacements de taches solaires [Aime01].

Considérons deux signaux $f(x, y)$ et $g(x, y)$, dont les transformées de Fourier peuvent s'écrire :

$$TF\{f(x, y)\} = F(u, v) = \iint f(x, y) e^{-2i\pi(ux+vy)} dx dy \quad (105)$$

$$TF\{g(x, y)\} = G(u, v) = \iint g(x, y) e^{-2i\pi(ux+vy)} dx dy$$

Supposons que l'on puisse écrire la fonction $g(x, y)$ comme une translation de $f(x, y)$ dégradée par un bruit. Alors on a :

$$G(u, v) = \iint [f(x - x_0, y - y_0) + o(x, y)] e^{-2i\pi(ux+vy)} dx dy \quad (106)$$

dans l'expression précédente (x_0, y_0) représente le vecteur déplacement et $o(x, y)$ le bruit aléatoire. L'équation (106) peut donc s'exprimer en fonction de $F(u, v)$ et s'écrire :

$$G(u, v) = \iint f(x, y) e^{-2i\pi(u(x+x_0)+v(y+y_0))} dx dy + O(u, v) = F(u, v) e^{-2i\pi(ux_0+vy_0)} + O(u, v) \quad (107)$$

Ainsi à partir de ces deux spectres on définit l'interspectre comme étant la multiplication $F(u, v)$ par le complexe conjugué de $G(u, v)$ noté $G^*(u, v)$. L'interspectre s'écrit donc :

$$I(u, v) = F(u, v) G^*(u, v) = F(u, v) F^*(u, v) e^{2i\pi(ux_0+vy_0)} = |F(u, v)|^2 e^{2i\pi(ux_0+vy_0)} \quad (108)$$

L'effet du bruit a pu être ignoré car celui-ci est dilué dans le signal et ne change donc pas fondamentalement l'analyse. Mais l'équation (108) montre que le spectre résultant de l'interspectre est une onde plane dont la direction de propagation est définie par le déplacement local (x_0, y_0) . En conséquence, pour obtenir le déplacement selon une des deux directions principales du repère, il suffit de décomposer le spectre selon les axes principaux du repère. Ainsi si l'on considère un déplacement ε suivant x , l'équation (108) peut s'écrire :

$$I(u) = |F(u)|^2 e^{2i\pi u \varepsilon} \quad (109)$$

A partir de l'expression précédente, le déplacement peut être déterminé en réalisant une régression linéaire de la partie linéaire de la phase. Donc, à partir de l'interspectre entre deux signaux, on peut déterminer le décalage sans ambiguïté et sans trop de difficultés. Néanmoins, pour des grandes valeurs de fréquences spatiales, un sous-échantillonnage ou du bruit peuvent provoquer une chute vers zéro du terme de phase en lieu et place de la

variation entre $-\pi$ et $+\pi$ classiquement observée. Ce phénomène est accentué pour des déplacements supérieurs à un pixel. Dans ce cas, s'ajoutent au phénomène décrit précédemment des discontinuités dans le terme de phase avec des passages brutaux entre $+\pi$ et $-\pi$ comme observé sur la Figure 79.

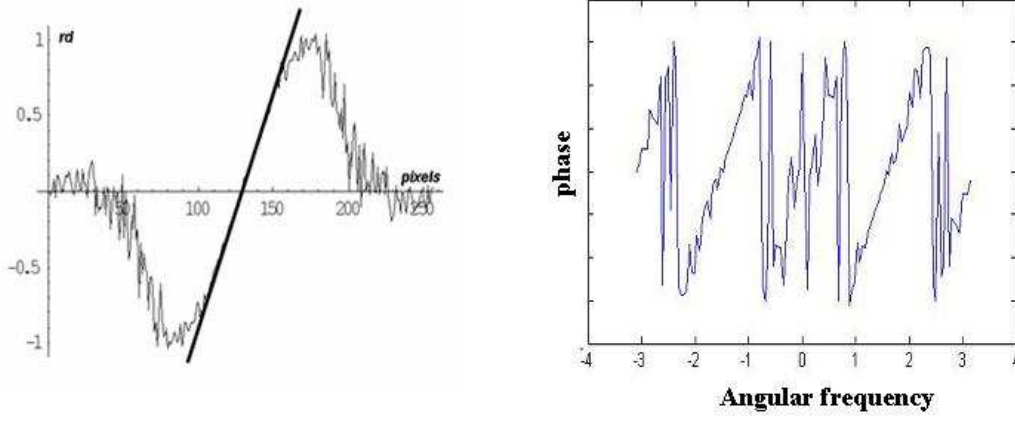


Figure 79: a) Exemple du calcul d'un déplacement. On note que la phase retombe à 0 pour les hautes fréquences spatiales; b) Exemple d'une représentation du terme de phase pour un déplacement supérieur à 1 pixel.

3.3 Intercorrélation dans le cas unidimensionnel continu

Dans ce paragraphe on ne considérera que des signaux unidimensionnels, mais la théorie présentée est très facilement transposable sur des signaux plus complexes (comme par exemple la décomposition en nuance de gris d'une image). Considérons deux signaux $f(x)$ et $g(x) = f(x - x_0) + o(x)$, le second étant une translation bruitée ($o(x)$) du premier. L'estimation de x_0 peut se faire en minimisant par rapport à ξ une norme bien choisie de la différence entre $g(x)$ et $f(x - \xi)$. Le problème de minimisation de la norme revient à trouver ξ qui maximise la quantité :

$$h(x) = g^*(x) \circ f(x - \xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} g^*(x) f(x - \xi) dx \quad (110)$$

où le symbole \circ représente le produit de convolution et $g^*(x)$ le complexe conjugué de $g(x)$. $h(x)$ représente la fonction de corrélation de $f(x)$ et $g(x)$. Si $f(x) = g(x)$ et que $o(x) = 0$, on parle alors d'auto-corrélation. Afin d'illustrer ce concept, considérons deux fonctions porte $f(x)$ et $g(x)$, la seconde $g(x)$ étant décalée de d par rapport à la première (Figure 80) :

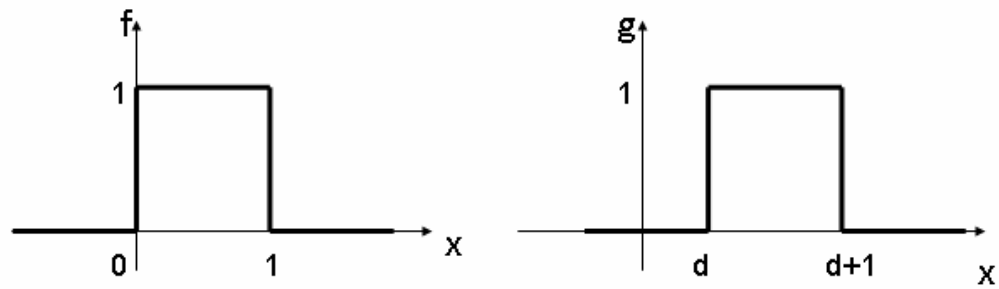


Figure 80 : fonctions $f(x)$ et $g(x)$ décalées d'un vecteur d .

Lorsque $x - \xi \geq 1$, il n'y a pas de recouvrement entre les deux fonctions, l'intercorrélation est nulle. Il en est de même lorsque $x - \xi + 1 \leq 0$. Pour des valeurs comprises entre ces deux bornes, la fonction de corrélation évolue linéairement et atteint son maximum pour $\xi = d$.

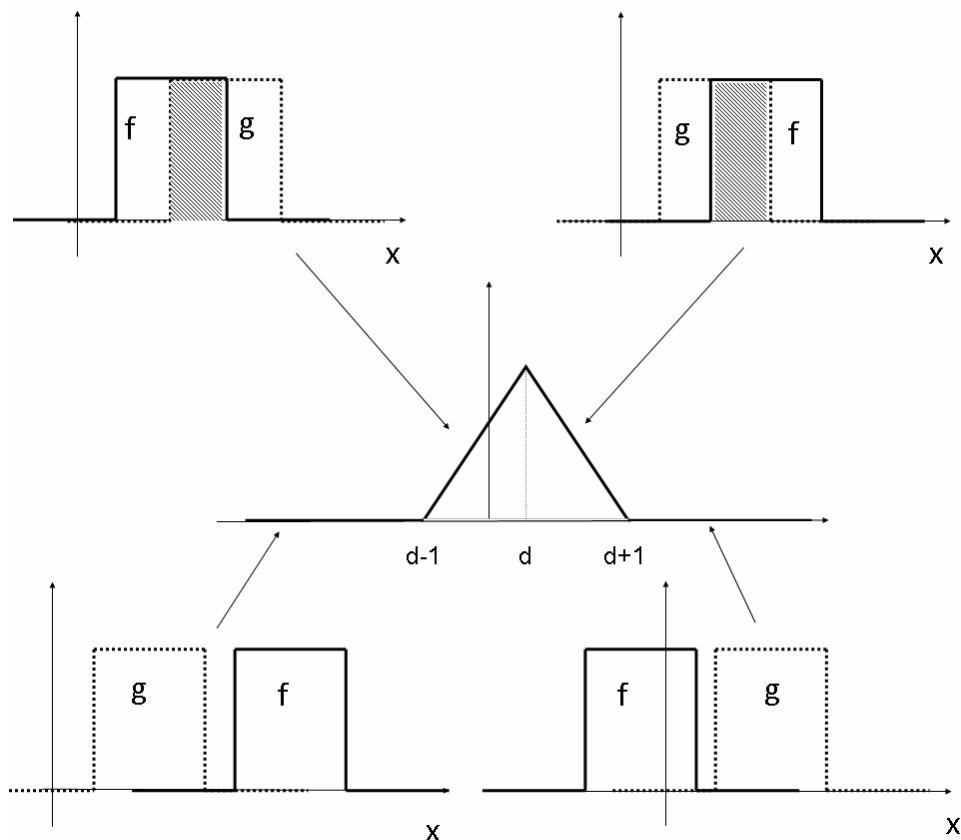


Figure 81: Intercorrélation de deux fonctions décalées

Si on suppose maintenant qu'une fonction est déformée par rapport à l'autre d'une quantité ϵ et que le niveau associé à la deuxième fonction est divisée par deux, il existe une décorrélation entre les deux fonctions. La fonction de corrélation tracée sur la Figure 82 s'en trouve donc impactée. Pour détecter le maximum qui correspond au déplacement moyen, il

est nécessaire d'utiliser une fonction d'interpolation au voisinage du maximum. Le choix de la fonction est déterminant.

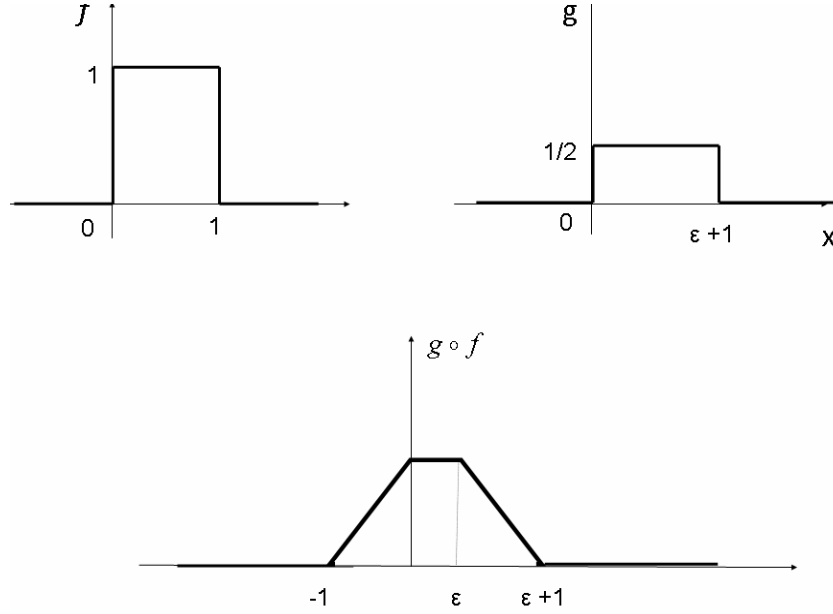


Figure 82: intercorrélation de deux fonctions déformées

3.4 L'intercorrélation: formulation de Fourier d'un cas bidimensionnel

Comme rappelé précédemment, l'intercorrélation est classiquement et couramment utilisée pour la mesure de déplacement par analyse d'image. En fait, à partir de l'équation (108) et en utilisant le théorème de Wiener Kinchine, il résulte que l'intercorrélation s'écrit comme la transformée de Fourier inverse de $I(u, v)$. Par conséquent, l'interspectre et l'intercorrélation contiennent les mêmes informations. Mais en pratique, il s'avère plus adéquat d'utiliser l'interspectre pour mesurer des faibles déplacements (surtout pour des déplacements inférieurs au pixel), tandis que l'intercorrélation s'avère plus efficace pour la mesure de grands déplacements. On définit la transformée de Fourier de $I(u, v)$ par:

$$I(\xi, \eta) = \iint I(u, v) e^{2i\pi(\xi u + \eta v)} du dv = \iint |F(u, v)|^2 e^{2i\pi(u(\xi - x_0) + v(\eta - y_0))} = \bar{I}(\xi - x_0, \eta - y_0) \quad (111)$$

Pour déterminer le déplacement d'une zone, il faut situer une fenêtre sur l'image de référence. De la deuxième image, on extrait la zone correspondante ayant la même taille et les mêmes coordonnées. En déplaçant la fenêtre de la seconde image, on cherche la position où leur similitude est la plus élevée. Ce décalage indique le vecteur déplacement moyen en pixel.

Puisque la corrélation de deux fonctions possède un maximum où les fonctions sont les plus similaires, la solution du problème consiste à créer la fonction d'intercorrélation de deux fonctions discrètes $f(x, y)$ et $g(x, y)$ qui représentent les distributions de valeurs de gris des deux images. Trouver le maximum de la fonction de corrélation, revient à déterminer le déplacement inconnu.

L'équation (111) définit la surface d'intercorrélation. Comme expliqué précédemment dans le domaine spatial, l'intercorrélation peut être considérée comme une translation entre deux images. Ainsi la position de la valeur maximum du pic de corrélation définit la valeur du déplacement. Mais cette valeur maximum du pic de corrélation résultant du déplacement est limitée par la taille du pixel. En effet, cela signifie que par une simple détection du maximum l'échelle est le pixel. Pour augmenter la précision des mesures et faire tendre l'analyse vers l'échelle sub pixel il est nécessaire de développer la méthode d'analyse avec des méthodes d'interpolation. Il existe plusieurs types de méthode d'interpolation comme les méthodes de lissage biparabolique par moindres carrés [DJ Chen 93] ou encore les méthodes « bicubic spline interpolation » [Huang 07]. Mais avec de telles méthodes, l'utilisation d'une technique d'interspectre s'avère plus rapide.

Parallèlement à la méthode d'intercorrélation classique telle qu'elle a été présentée ci-dessus, des méthodes légèrement différentes ont été développées, comme par exemple celle utilisée dans le logiciel commercial Aramis. Dans ce cas l'image est toujours discrétisée en niveau de gris, mais l'interpolation s'effectue sur ces niveaux de gris, afin de ne plus avoir une distribution discrète des niveaux de gris, mais continue. A partir de ces expressions, il est possible de calculer un coefficient de corrélation [Yang07]. Ce coefficient correspond aux écarts de distribution de niveaux de gris présents dans la fenêtre de corrélation. Différentes formes peuvent être proposées [Chambon 03]. Mais l'ensemble des expressions ont la propriété de s'annuler lorsque les deux fenêtres sont identiques. Donc le déplacement entre deux images est donné par la minimisation du coefficient de corrélation. Cette minimisation nécessite l'utilisation d'un algorithme d'optimisation. C'est à dire qu'il s'agit d'optimiser un ensemble de paramètres définissant un déplacement. Le meilleur jeu de paramètres donne la minimisation du coefficient de corrélation et donc le déplacement.

Mais une fois encore, on constate que cette technique nécessite l'utilisation d'algorithmes coûteux en terme de temps de calcul.

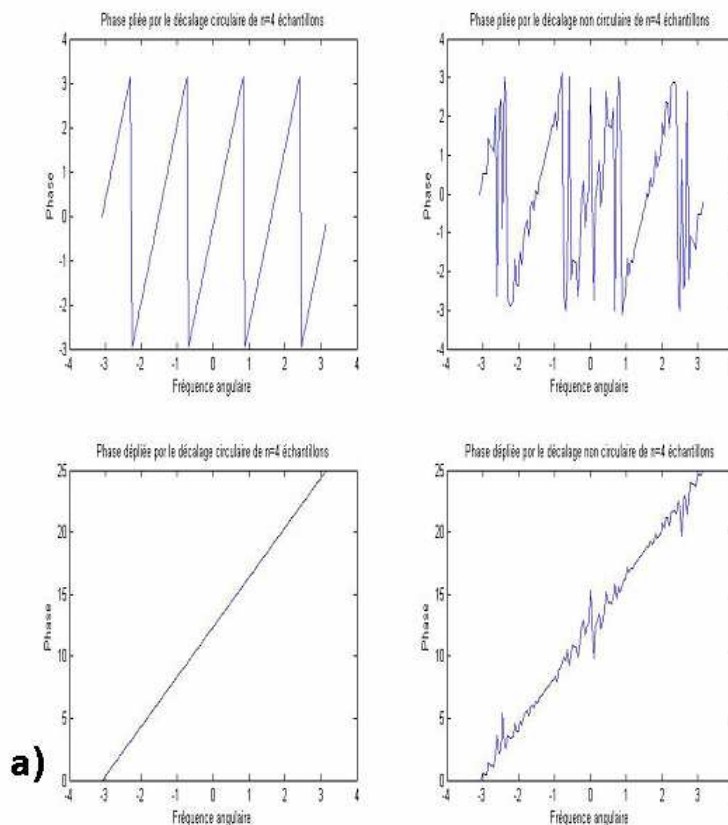
4. Mise en place d'un nouvel algorithme hybride

4.1 Les limites de l'interspectre : décalage non circulaire dans le calcul de déformation

Il est bien connu que l'effet d'un décalage circulaire d'un signal discret dans sa DFT (Discrete Fourier Transform) est d'introduire un facteur de phase linéaire. Le produit de la DFT d'un signal et de la DFT du même signal décalé circulairement produit une phase linéaire dont la pente nous donne exactement à un facteur près le décalage. Le problème se présente lorsque l'on ne connaît pas le décalage (comme dans le cas d'une image qui bouge) et que l'on veut le déterminer en réalisant cette opération d'interspectre en deux dimensions. Dans ce paragraphe, on va chercher à estimer les perturbations sur la linéarité de la phase lorsque l'opération d'interspectre est faite avec la DFT d'un signal décalé non circulairement, ce qui est le cas du dépouillement de la technique Speckles. On se propose

alors de faire une simulation dans le cas unidimensionnel. Pour ce faire, on génère un vecteur unidimensionnel de nombres générés aléatoirement suivant la loi normale $N(0,1)$ (pour la taille du vecteur on choisit 128 pour augmenter l'efficacité de l'algorithme FFT). Ce signal est la réalisation de longueur finie d'un processus stochastique à densité spectrale de puissance plane. Il s'agit du signal le plus riche en fréquences qu'on puisse avoir. On effectue alors l'interspectre d'abord avec un signal décalé circulairement, et puis avec un signal où l'espace laissé par les échantillons décalés est rempli avec des nombres aléatoires. Dans ce deuxième cas, on simule ce qui se produit lors d'un essai mécanique, puisqu'une partie de l'image (c'est-à-dire un ensemble de speckles) sort du carré de mesure tandis qu'une nouvelle image rentre de l'autre côté.

Comme illustré par la Figure 83 à partir d'un certain seuil de décalage (ici 5 échantillons), on remarque de fortes perturbations dans la linéarité de la phase de l'interspectre. Et l'on observe que ces perturbations influent sur le dépliage de la phase (et par conséquent sur la mesure de la pente), ce qui n'était pas le cas pour un déplacement de 4 échantillons.



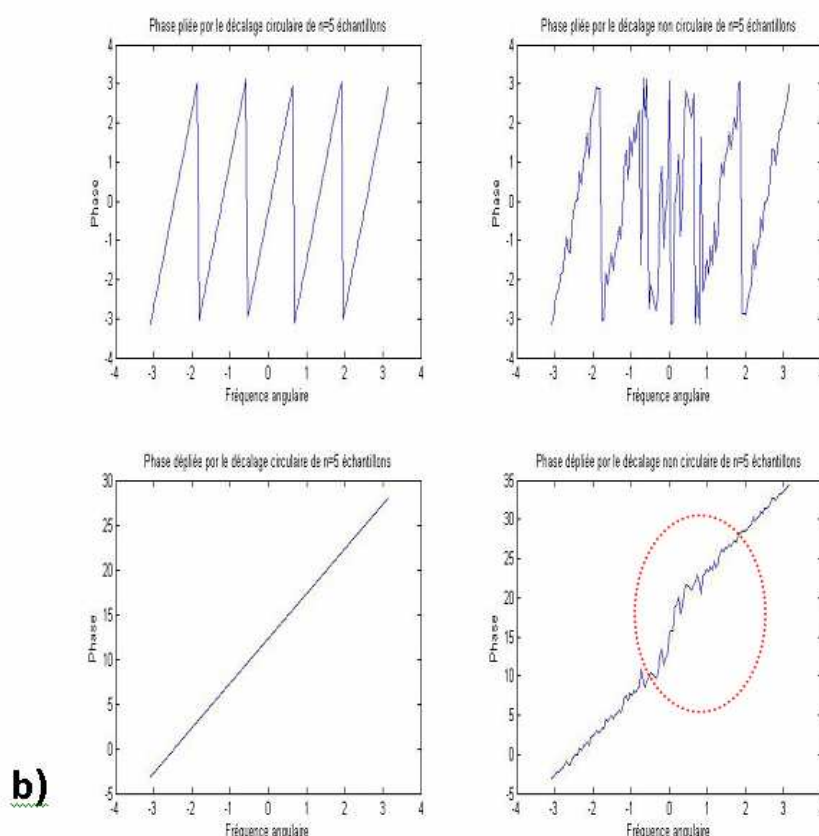


Figure 83 : influence du décalage circulaire sur la phase pliée et dépliée pour des déplacements de 4 échantillons (a) et 5 échantillons (b). On remarque que pour un décalage de 5 échantillons la phase dépliée devient discontinue, ce qui provoque une erreur dans la mesure du déplacement.

4.2 Avantages et inconvénients de l'interspectre et de l'inter corrélation pour nos applications

Chacune de ces méthodes présentent des avantages et des inconvénients. L'intercorrélation est un algorithme qui a la particularité d'être assez lent du fait de l'utilisation de fonction d'interpolation pour obtenir des mesures à l'échelle du subpixel. En revanche, il se montre particulièrement utile pour mesurer des grands déplacements. A l'inverse l'interspectre se montre beaucoup plus efficace pour la mesure des petits déplacements que pour des grands. De plus, il est particulièrement aisé de réaliser des mesures à l'échelle du sub pixel avec ce dernier. Enfin, l'interspectre ne nécessitant pas l'utilisation de fonctions d'interpolation complexes, celui-ci se montre plus rapide que l'intercorrélation. Comme on peut le voir, ces algorithmes présentent des avantages et des inconvénients, mais ils s'avèrent assez complémentaires.

4.3 Vers un nouvel algorithme hybride(CC-CS)

En réponse aux limitations présentées précédemment, nous avons couplé l'intercorrélation (« cross correlation » en anglais) et l'interspectre (« cross spectrum ») dans un nouvel algorithme hybride nommé CC-CS comme cross correlation/cross spectrum. L'algorithme développé a été implémenté sous LabView. Le principe de la méthode est présenté schématiquement par la Figure 85. En pratique, à partir de deux sub-images définies à partir de deux images de speckles consécutives, nous réalisons une intercorrélation qui permet de détecter un déplacement à l'échelle du pixel. L'une des deux sub-images est alors translatée du déplacement trouvé. A partir de ces deux nouvelles zones d'étude nous réalisons un interspectre qui nous permet de déterminer un déplacement complémentaire inférieur au pixel. Le déplacement total est donc la somme des déplacements déterminés par les deux méthodes.

Dans la méthode présentée précédemment, une image peut être divisée en une grille de sub-images dont la taille peut varier de 8x8 à 256x256 pixels. L'algorithme est alors appliqué à chaque couple de sub-image. Les sub-images peuvent être définies parfaitement contiguës ou se chevauchant.

En pratique, deux images sont prises en compte, la première étant l'image de « référence » et la seconde l'image « déformée ». L'image de référence, schématisée sur la Figure 84, est maillée par un ensemble de sub-images (ou carrés d'analyse) qui forme la zone d'étude pour la mesure de champ. La zone d'étude dont la taille $M \times N$ est donnée par la résolution du capteur CCD, est composée de sub-images dont la taille $n \times n$ peut varier typiquement de 8x8 à 256x256 pixels. L'image déformée est maillée de la même façon.

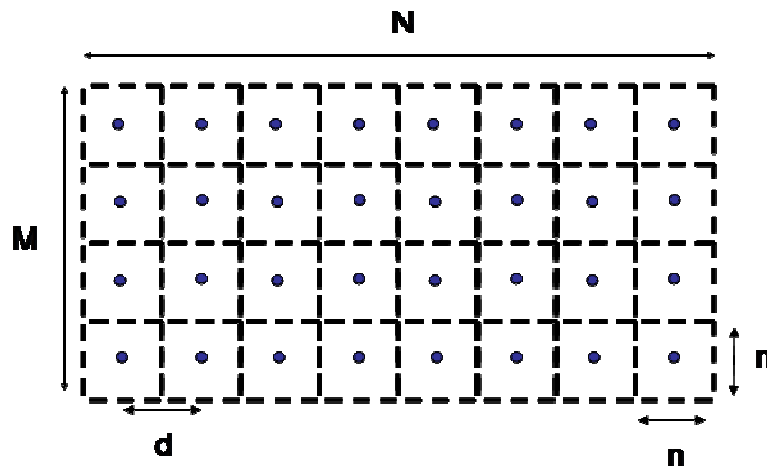


Figure 84 : Zone d'étude sur une image de référence

La valeur du déplacement est calculée au centre de chaque sub-image. Chaque centre de sub-image est séparé d'une distance d . Si $d=n$ alors les carrés sont juxtaposés, mais d est classiquement inférieur à n , c'est-à-dire qu'on considère des carrés d'analyse se chevauchant. Un premier calcul de corrélation est réalisé par transformée de Fourier rapide

sur chaque carré d'analyse. La valeur maximale du produit d'intercorrélation permet d'estimer le déplacement moyen calculé sur l'ensemble des pixels d'un carré d'analyse. Le centre du carré d'analyse de l'image déformée est alors décalé de la valeur du déplacement par rapport au centre du carré d'analyse de l'image de référence. Un deuxième calcul, un calcul d'interspectre est ensuite réalisé sur chaque carré d'analyse. Un algorithme permet ensuite d'obtenir des déplacements sub-pixel.

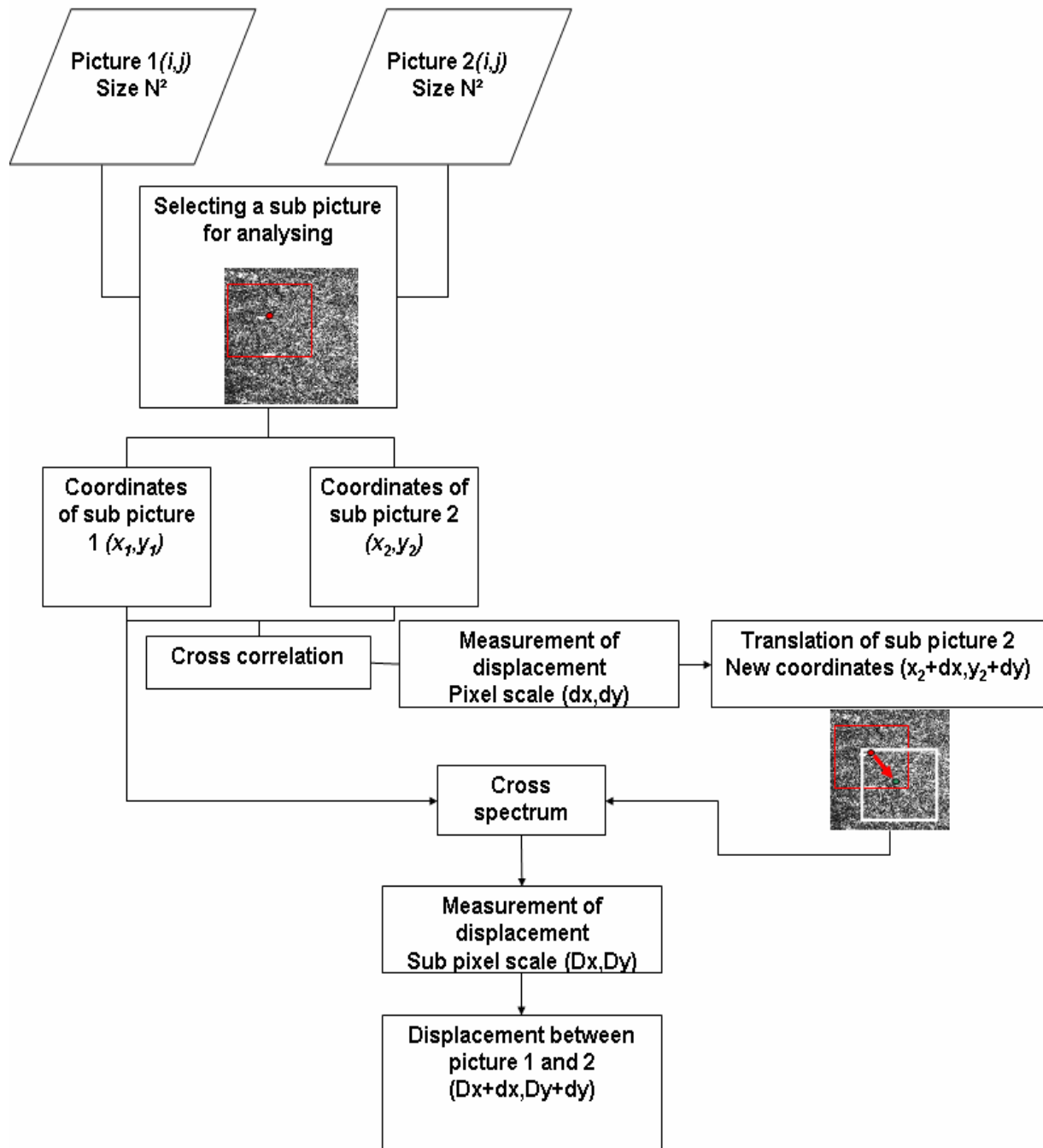


Figure 85: schéma de l'algorithme couplant intercorrélation et interspectre

4.4 Validation numérique de l'algorithme

Afin de montrer la précision et la fiabilité de l'algorithme présenté ci-dessus, des premiers tests purement numériques ont été effectués. Ils consistaient à appliquer à l'aide d'un logiciel de traitement d'image (GIMP dans le cas présent) sur une image speckle (800x800 pixels) un déplacement connu. Une fois ce déplacement imposé, l'image ainsi obtenue est comparée à l'image initiale, et le champ de déplacement résultat est comparé avec la consigne appliquée. Dans l'ensemble, des essais décrits ci-dessous, l'image a été maillée de carrés de 32 x 32 pixels avec un décalage de 16 pixels.

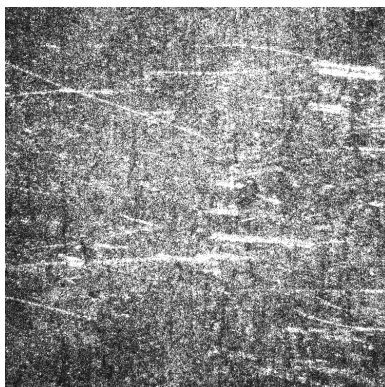


Figure 86: image speckle « initiale » utilisée pour les essais numériques (800x800 pixels)

A. Rotation de corps solide

Par rapport à l'image initiale, l'image déformée subit une rotation de 2° autour de son centre. Pour plus de clarté, les résultats sont présentés sur une sub-image couvrant une région de 200 x 200 pixels autour du centre de l'image initiale. La Figure 87 montre le champ vecteur résultat ainsi que sa norme. Comme attendu le déplacement est faible au centre et croît linéairement en s'approchant des bords du cadre d'analyse.

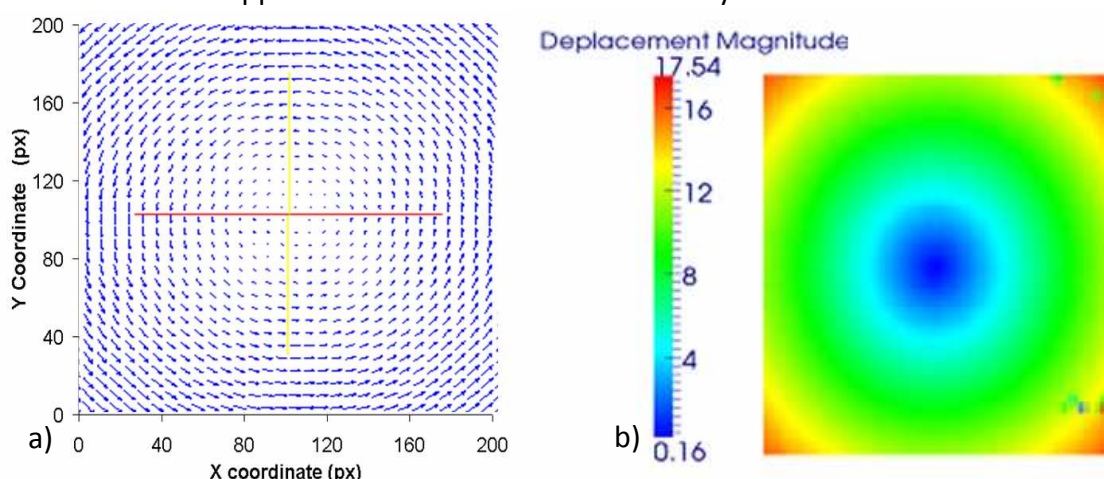


Figure 87: exemple de l'utilisation de l'algorithme CC-CS sur des images numériques: a) champ de vecteurs déplacements pour une rotation imposée, b) norme du champ (en pixels) pour cette même consigne.

B. Test de traction numérique

La même image initiale est maintenant soumise à un étirement de 5 pixels selon une direction. L'image initiale est fixée sur son bord inférieur et le bord supérieur est déplacé de 5 pixels. L'image initiale a été découpée en un maillage de carrés d'analyse (de 16x16 pixels). Sur la Figure 88 présentant le champ de déplacement vertical, chaque carré représente une zone d'analyse. Le déplacement vertical est tracé selon z pour chaque point de coordonnées (x,y) . On peut remarquer que le déplacement varie linéairement du bord inférieur vers le bord supérieur, ainsi qu'il reste nul sur le bord inférieur et est égal à la consigne sur le bord supérieur. Le fait que le champ soit continu montre la précision sub pixel de l'algorithme utilisé. De plus ceci montre que le fait de diviser l'image en plusieurs sub-images et de considérer que leur déplacement est constant est totalement valide.

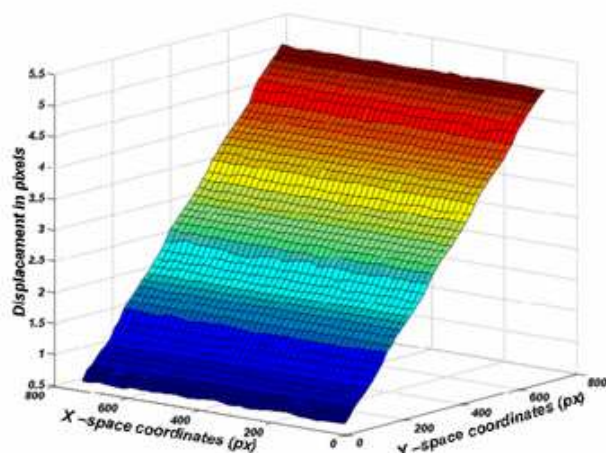


Figure 88: champ de déplacement vertical après la traction numérique

4.5 Problème classique en traitement du signal : l'effet du sous-échantillonnage.

Il est bien connu que le sous-échantillonnage provoque le chevauchement des hautes fréquences du spectre du signal continu, rendant impossible la reconstruction du signal à partir des échantillons. Les signaux limités dans le temps donnent lieu à des spectres non-nuls presque partout, mais on peut fréquemment déterminer une largeur de bande hors de laquelle le spectre du signal continu a un module négligeable. Si la fréquence de Nyquist de l'échantillonnage est hors de cette bande, on peut considérer que le vecteur d'échantillons (toujours dans le cas d'un signal fonction d'une seule variable spatiale ou temporelle) représente fidèlement le signal. Un traitement plus détaillé des effets spectraux de la décimation peut être trouvé dans Oppenheim et al. [Oppenheim 99]. On y démontre qu'une décimation de M échantillons d'un signal discret produit le même résultat que la réalisation d'un échantillonnage sur le signal continu avec un nombre d'échantillons M fois inférieur. C'est-à-dire, que si :

$$TF\{x[n]\} = X(e^{j\omega}) \quad (112)$$

alors pour $y[n] = x[nM]$

$$TF\{y[n]\} = Y(e^{j\omega}) = \frac{1}{M} \sum_{s=0}^{M-1} X(e^{j(\omega - \frac{2\pi s}{M})}) \quad (113)$$

On peut donc modéliser un sous-échantillonnage avec la décimation d'un vecteur dont la transformée de Fourier est clairement limitée en fréquence. Si la décimation est assez grande pour provoquer un effet de repli spectral important, on peut s'attendre à des effets importants sur la phase de l'interspectre. On montre (Figure 89) une fonction qui représente graphiquement les résultats d'une telle démarche. Comme signal on utilise du bruit blanc filtré passe bas, appelé aussi bruit coloré (on utilisera toujours un filtrage Butterworth d'ordre trois).

Comme le montre la Figure 89, le sous-échantillonnage a pour effet de produire une pente dans la phase qui est différente de celle attendue, ce qui dans ce cas donnerait une mesure de déplacement erronée. En effet sur la Figure 89, bien que l'on décale le signal de 1, la phase ne varie pas entre $-\pi$ et π . Donc le meilleur moyen pour améliorer nos résultats serait d'augmenter la résolution de nos mesures. Cela signifie avoir une taille de scène (taille de l'image à analyser) pas trop importante afin d'éviter qu'un pixel ne voit plusieurs nuances de gris.

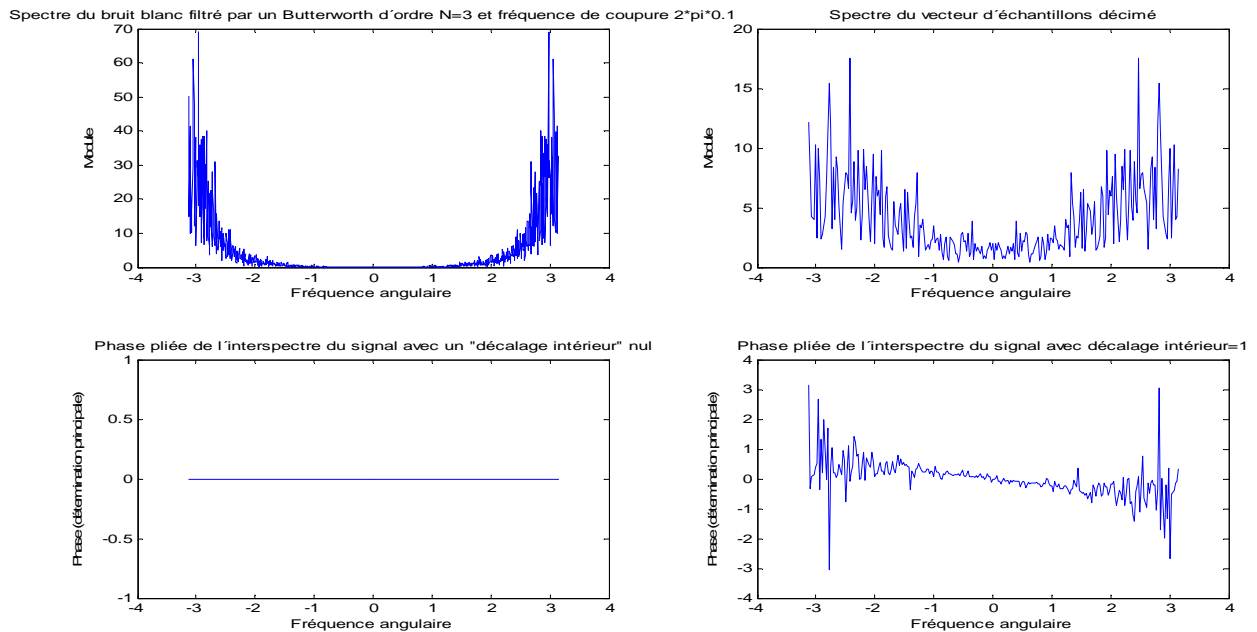


Figure 89: effet du sous-échantillonnage. Signal initial (à gauche) et signal décimé (à droite)

5. Dispositif de mesure installé au Cemef

5.1 Description du montage expérimental

L'instrumentation complète est présentée sur la Figure 90 et est représentée schématiquement sur la Figure 91. Comme le montrent les photographies présentées (Figure 90), le montage Speckles a directement été installé sur la machine de traction Taboo. Ce montage se compose de quatre éléments principaux, un laser, une lentille, un filtre et une caméra CCD munie d'un objectif télé-centrique. Comme le montre [Orteu], l'utilisation d'un objectif télécentrique permet de diminuer de manière significative les effets des déplacements hors plans de l'échantillon lors d'un essai.



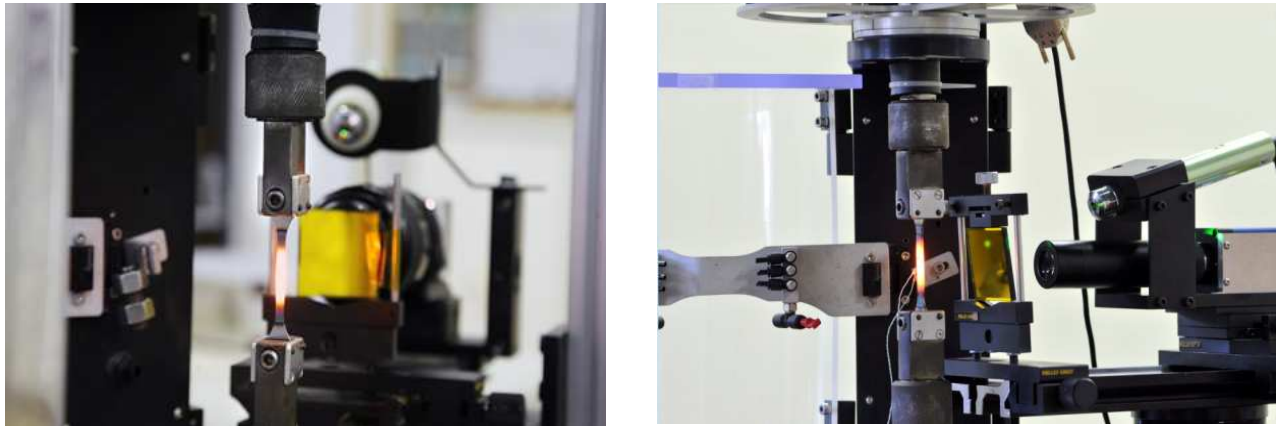


Figure 90 : photographie du dispositif expérimental sur la machine Taboo

La source laser est élargie grâce à l'objectif d'un microscope et est projetée sur la zone où doit être mesurée la déformation. Ceci permet de mesurer des déplacements sur une large zone de l'éprouvette (typiquement 10 x 6 mm). Le filtre vert est utilisé pour s'affranchir des rayonnements de l'éprouvette rougeoyante. Les speckles causés par les rugosités de surface sont capturés par une caméra CCD et stockés sur un PC. La zone d'étude équivaut sur le capteur à une surface de 1920 x 1080 soit environ 2Mpixels. Chaque pixel est stocké en nuance de gris sur une échelle de 0 à 255 (soit 8-bit). Ce montage est résumé schématiquement sur la Figure 91

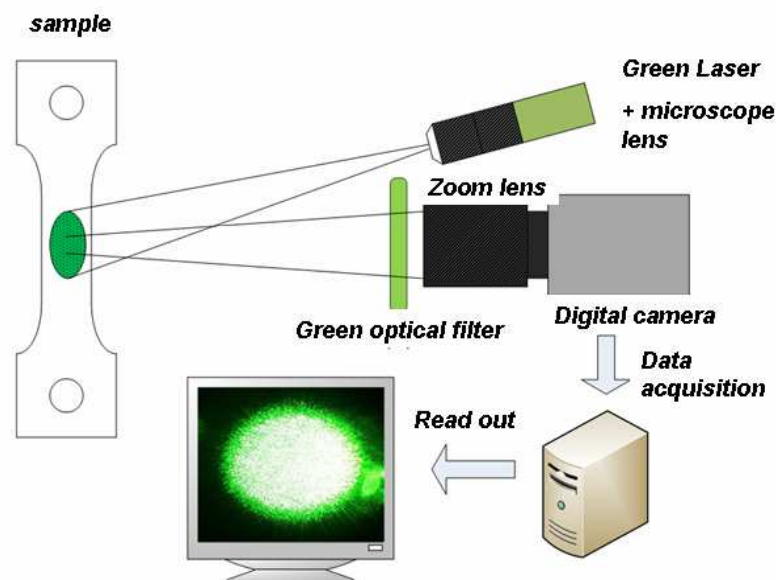


Figure 91 : schéma de principe du dispositif expérimental installé sur la machine Taboo.

Le processus de formation de l'image dans la caméra convertit l'intensité continue du signal en une zone d'intensité discrète, comme illustré à la Figure 92.

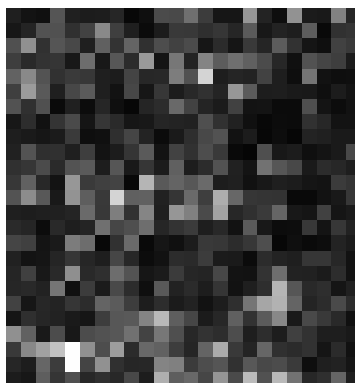


Figure 92 : exemple d'un mouchetis speckles 25 x 25 pixels.

5.2 Validation de la nouvelle méthode sur des essais à froid

A. Mouvement de translation

L'échantillon (une éprouvette Taboo) est placé sur une table de translation munie d'une vis micrométrique. Le spot laser est projeté sur l'éprouvette afin de produire le mouchetis. Des translations sont alors appliquées sur l'échantillon via la vis micrométrique. Celle-ci permet de réaliser des déplacements minimum de $0,5 \mu\text{m}$ et sa précision est de l'ordre du dixième de micron. Nous avons réalisé différents tests pour différentes valeurs de translation. Une première série pour des translations comprises entre 2 et $20 \mu\text{m}$. Une deuxième série pour des translations plus importantes, de $60 \mu\text{m}$ à $1,5 \text{ mm}$. Les résultats obtenus par corrélation d'image à l'aide de l'algorithme CC-CS sont présentés Figure 93. Pour la série de faibles translations, en considérant la résolution de la caméra, les déplacements imposés sont compris entre 0,26 et 2,6 pixels.

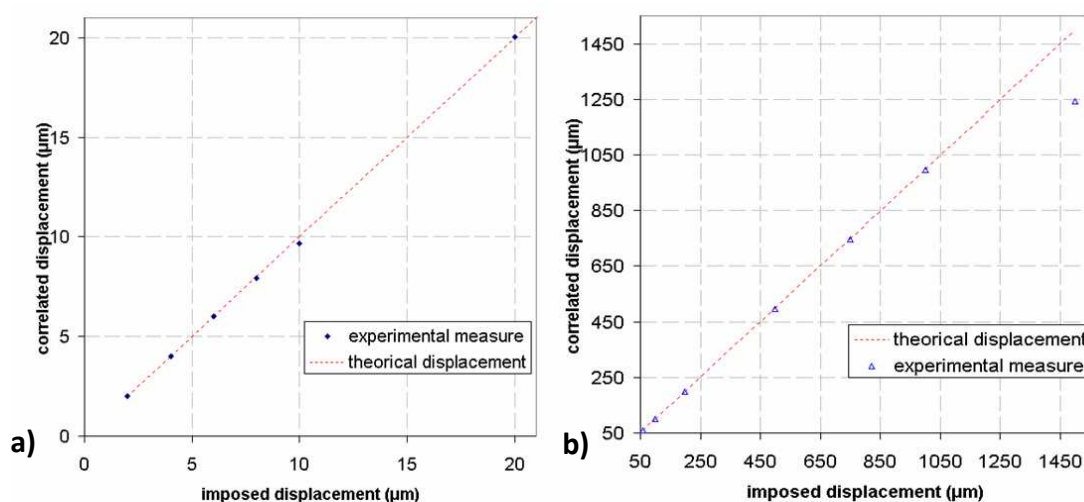


Figure 93: résultats en translation pour de faibles déplacements a) et pour de plus grands déplacements b)

Ceci montre à nouveau l'efficacité de l'algorithme lorsqu'il s'agit de mesurer des déplacements inférieurs au pixel. Pour des translations plus importantes, nous remarquons

que les résultats sont concordants jusque 1mm environ. Au-delà de ce niveau de translation, l'image initiale et finale diffèrent trop l'une de l'autre (Figure 93b).

B. Essais de traction à froid

Une éprouvette (Figure 94) entaillée de 25 mm de large, 120mm de long et 1mm d'épaisseur a été utilisée pour des essais de traction à froid sur une machine hydraulique Dartec.

Un côté de l'éprouvette a été recouvert d'un mouchetis de peinture noire et blanche, tandis que l'autre côté a été éclairé par le spot laser. Sur la Figure 95, on présente l'éprouvette placée sur la Dartec. La face visible est celle recouverte de speckles. Les images telles qu'elles sont observées et enregistrées sont montrées de part et d'autre de la photo du montage. Différentes images à différents temps ont été enregistrées. Différentes comparaisons ont été réalisées sur ces essais, dans le but de vérifier la méthode et l'algorithme.



Figure 94 : éprouvette en acier inox utilisée pour les essais de traction à froid

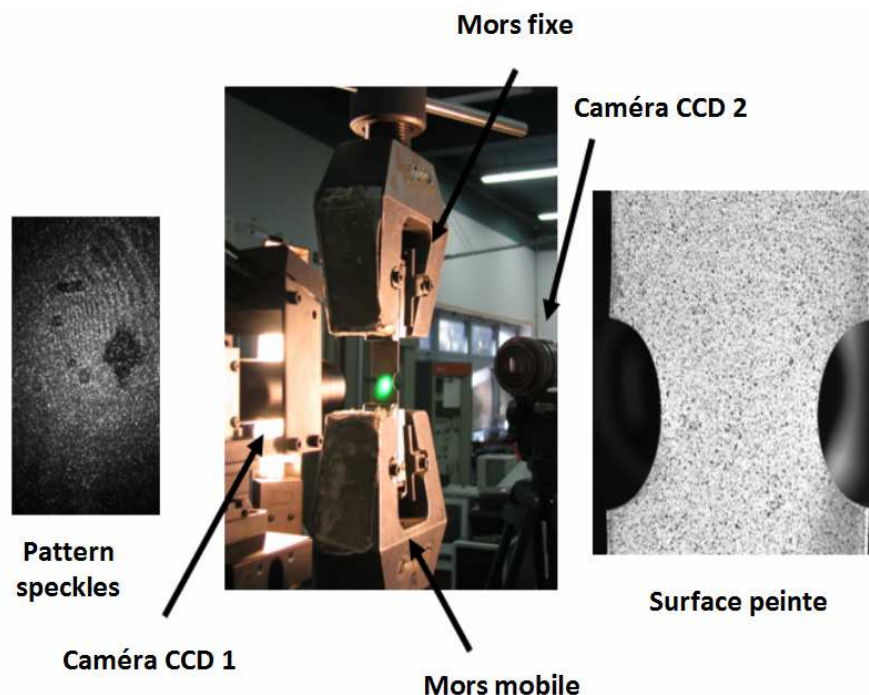


Figure 95 : montage utilisé sur la Dartec, deux caméras, deux types de mouchetis. A gauche le mouchetis laser enregistré par la première caméra, à droite le mouchetis peinture enregistré par l'autre caméra.

a) Comparaison des résultats obtenus sur la face peinte

Notre algorithme ainsi que l'algorithme commercial Aramis ont été utilisés sur la surface peinte des éprouvettes. Les cartes de déplacement ainsi qu'une coupe transversale du déplacement sont présentées Figure 96 . Dans les deux cas, les résultats s'avèrent être similaires.

On peut néanmoins noter de petites différences : d'une part sur le champ issu de analyse CC-CS certaines zones sont aberrantes, cela vient probablement du fait qu'à ces endroits la taille des sub-images choisies était insuffisante par rapport au mouchetis pour satisfaire la condition de taille de pattern convenable. Ceci n'est pas observé sur les images traitées par Aramis, cela vient sans doute de l'algorithme qu'utilise Aramis. En effet le maillage de l'éprouvette en sub-images n'est pas séquentiel sur Aramis, mais plus aléatoire en partant de certains points où le taux de corrélation est le meilleur.

D'autre part on remarque un décalage sur la fin de la courbe. Il semble que ce décalage puisse aussi être expliqué par la méthode de maillage qu'utilise Aramis. Avec notre algorithme les bords sont moins bien pris en compte, puisque les derniers cadres ont une partie qui dépasse la zone d'analyse.

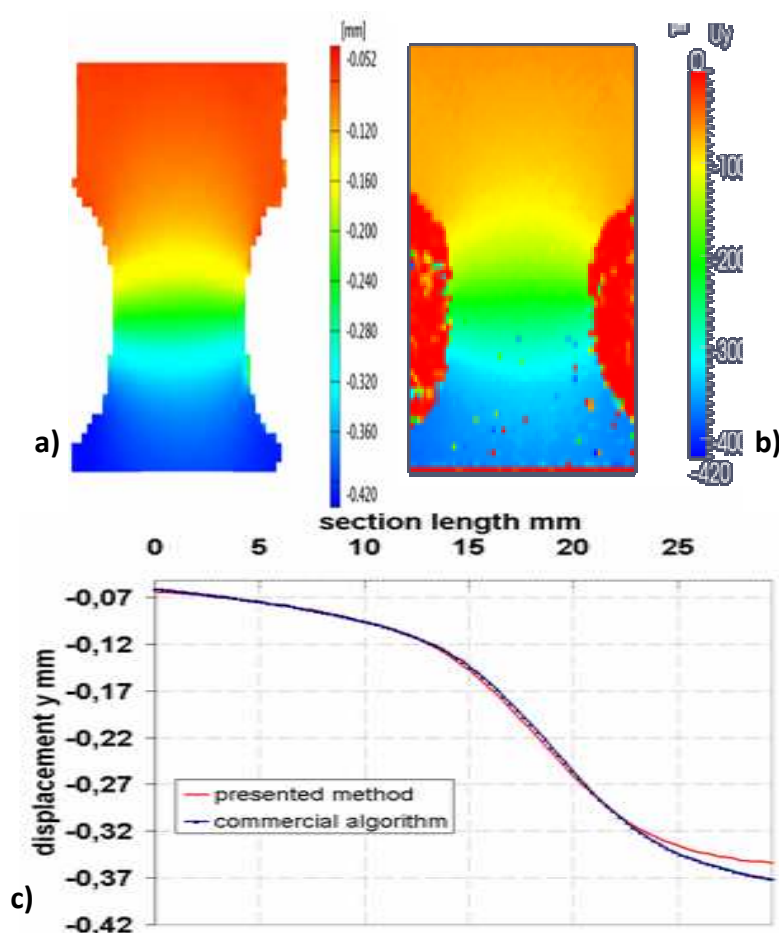


Figure 96: distribution du déplacement vertical obtenu sur un mouchetis peinture. Analyse par Aramis (a) et avec notre algorithme (b). En bas, comparaison des courbes de déplacement (c)

b) Comparaisons des résultats obtenus sur le mouchetis laser

Dans cette partie, nous considérons uniquement la face couverte par un mouchetis laser. Les déplacements enregistrés sur cette face sont analysés avec les deux algorithmes décrits et utilisés dans le paragraphe précédent. Les résultats présentés par la Figure 97, montrent un bon accord entre les champs de déplacement. Ceci se vérifie sur le graphique du déplacement longitudinal. On remarque néanmoins une différence sur les champs obtenus. En effet sur le champ de déplacement obtenu à l'aide de Aramis, certaines zones du mouchetis n'offrent pas une qualité suffisante pour être dépouillées. En fait, comme Aramis se base sur un coefficient de corrélation, si celui-ci n'arrive pas à être suffisamment minimisé les zones d'analyse n'apparaissent pas. Ceci provient certainement d'un mauvais contraste dans les zones en question. A la vue de ces résultats, notre algorithme semble être plus performant et plus robuste que l'algorithme commercial pour des speckles laser.

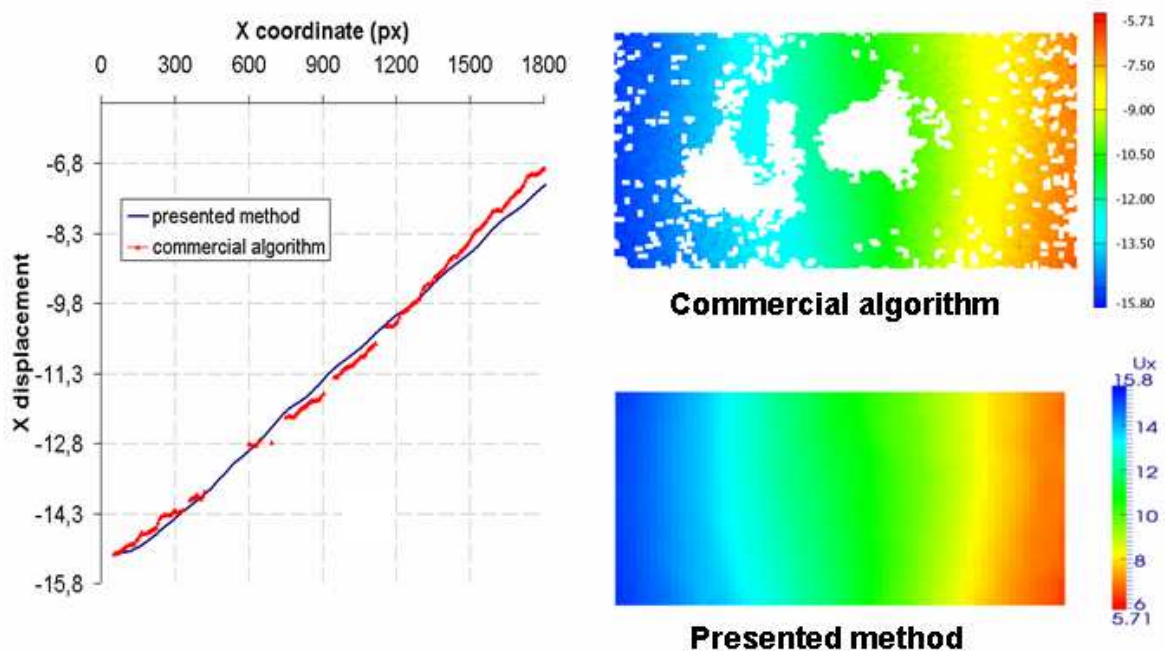


Figure 97 : champ de déplacement vertical déterminé grâce à Aramis (droite-haut) et grâce à l'algorithme hybride (droite-bas). A gauche la comparaison des courbes de déplacement.

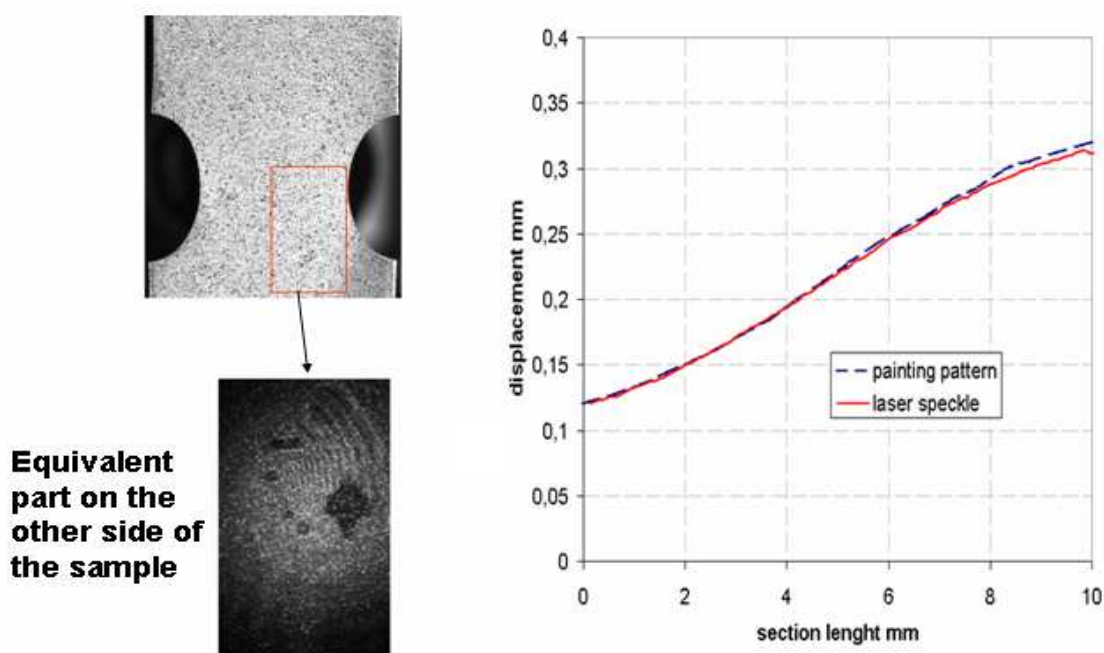


Figure 98: a) surface peinte en noir et blanc et son équivalent sur la face opposée, éclairée par un laser b) comparaison des déplacements obtenus sur les deux faces, en utilisant les deux techniques et les deux algorithmes

c) Comparaison des résultats sur les deux mouchetis (peinture et speckles).

On considère deux images, une initiale et une déformée, et ce pour le mouchetis peinture ainsi que pour le mouchetis laser. On a donc quatre images, deux sur chacune des deux faces. Ces images sont analysées deux à deux. L'analyse du mouchetis peinture est réalisée avec Aramis, l'analyse du mouchetis laser est faite grâce à notre algorithme. La Figure 98 montre une comparaison du déplacement selon un profil longitudinal des déplacements obtenus respectivement à partir d'Aramis et de l'algorithme CC-CS. Ces courbes ont été obtenues après un recalage du 0 entre le déplacement mesuré sur la face peinte et celui mesuré sur la face éclairée par le laser. On note qu'après recalage les résultats obtenus sont très proches.

En conclusion de ces essais de validation à froid, on note d'une part, comme les essais de translation nous l'ont montré, que la gamme de mesures offerte par cette technique est assez large, ce qui rend possible l'utilisation de cette méthode pour des vitesses de déformations plus élevées que celles rencontrées dans nos essais. Quant aux validations croisées menées sur les essais de traction à froid, elles nous ont permis de mettre en évidence la fiabilité aussi bien de la méthode des speckles que de l'algorithme utilisé.

6. Dispositif de mesure développé chez Ascometal

Dans le cadre du projet ANR Cracks, Ascometal est en charge de la caractérisation rhéologique des nuances 100Cr6 et 40CMD8. Cette caractérisation s'effectue sur une Gleeble 3800. Ascometal comme le Cemef possède des extensomètres haute température. Mais comme pour celui utilisé au Cemef, ils sont limités à 1100°C. Cette problématique nous a conduit à réfléchir à une utilisation des speckles, en cours de développement au Cemef, sur la machine Gleeble, avec des contraintes différentes de celles rencontrées sur Taboo. D'une part le montage doit pouvoir s'insérer dans l'espace restreint d'une Gleeble et d'autre part pouvoir être utilisable avec la géométrie d'éprouvettes standard. En effet les géométries d'éprouvettes utilisées sur Gleeble sont axisymétriques, rendant difficile l'utilisation d'un montage Cemef. Il nous a donc fallu concevoir un nouveau montage. Nous nous sommes encore plus inspirés de l'astrophysique. En effet à la différence du montage Cemef, nous avons choisi de ne pas filmer la surface de l'éprouvette, mais plutôt d'utiliser les speckles produits par la surface et « présents dans l'air ambiant ». Ces speckles pouvant être observés directement à l'aide d'un capteur CCD.

6.1 Description du montage expérimental

On distingue deux types de speckles, les speckles dits objectifs de ceux dits subjectifs. La principale différence provient de l'utilisation ou non d'un moyen optique pour produire ces speckles. Comme le montre la Figure 99, un speckle objectif se forme dans l'espace et peut être directement observé sur un écran (plaque photographique, CCD...). Dans le cas d'un speckle objectif chaque point sur l'écran est formé par la réflexion des rayons sur la surface rugueuse.

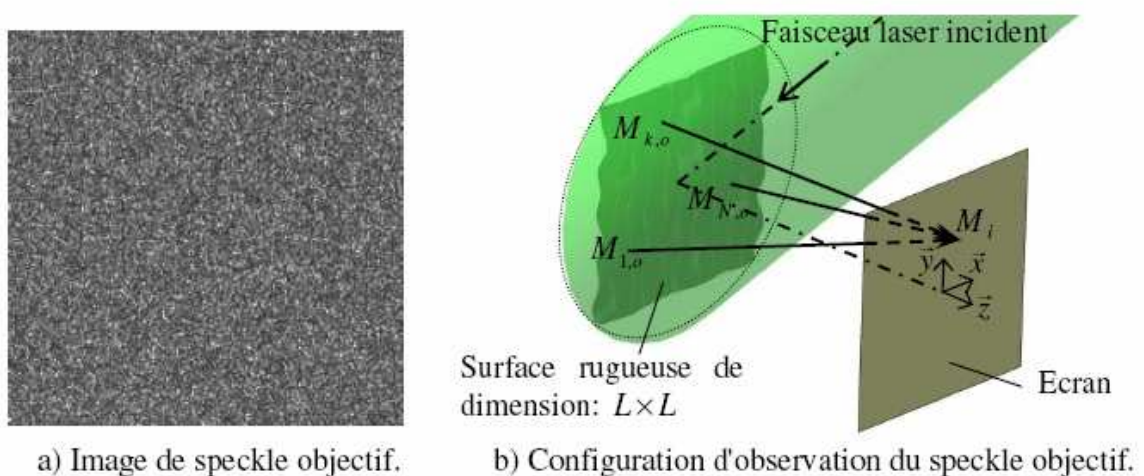


Figure 99: illustration de la notion de speckles objectifs (<http://www.mines-ales.fr/CMGD/ILOA/ILOA.html>)

A. Principes du système de mesure

Pour concevoir et développer le système mis en place chez Ascométal, nous nous sommes basées sur cette notion de speckles objectifs. En fait la difficulté avec des éprouvettes cylindriques est de pouvoir réaliser une mise au point sur la surface d'une éprouvette cylindrique sans craindre des aberrations optiques dues à la courbure des éprouvettes. Ce système de speckles objectifs nous permet de nous affranchir de ce problème. Par contre avec un tel système, la mesure se trouve être très locale. On a donc conçu un système de type extensomètre.

En effet dans le cas présent, comme le montre la Figure 100, pour réaliser un montage de type extensomètre, nous avons utilisé deux lasers (puissance 5 mW) et deux caméras fireware CCD (1280 x 1024 pixels). Ces lasers pointés de part et d'autre de la zone utile de l'éprouvette sont utilisés pour mesurer le déplacement des deux points de matière. L'allongement de la zone de mesure se calcule comme la différence des déplacements entre les deux taches laser. Comme pour le montage Taboo, pour s'affranchir du rayonnement haute température, des lasers verts ainsi que des filtres verts sont utilisés.

Chaque laser agissant comme une source lumineuse éclaire la surface de l'éprouvette, les rugosités de celle-ci diffractent les rayons laser qui vont interférer entre eux. Ces interférences forment deux images qui sont capturées en continu par les deux caméras. Chaque série d'images obtenue par l'une ou l'autre des caméras sont traitées indépendamment en utilisant une technique décrite précédemment dans ce chapitre. De plus, afin de garder une bonne corrélation entre deux enregistrements, le déplacement total est calculé comme la somme d'une série de petits déplacements.

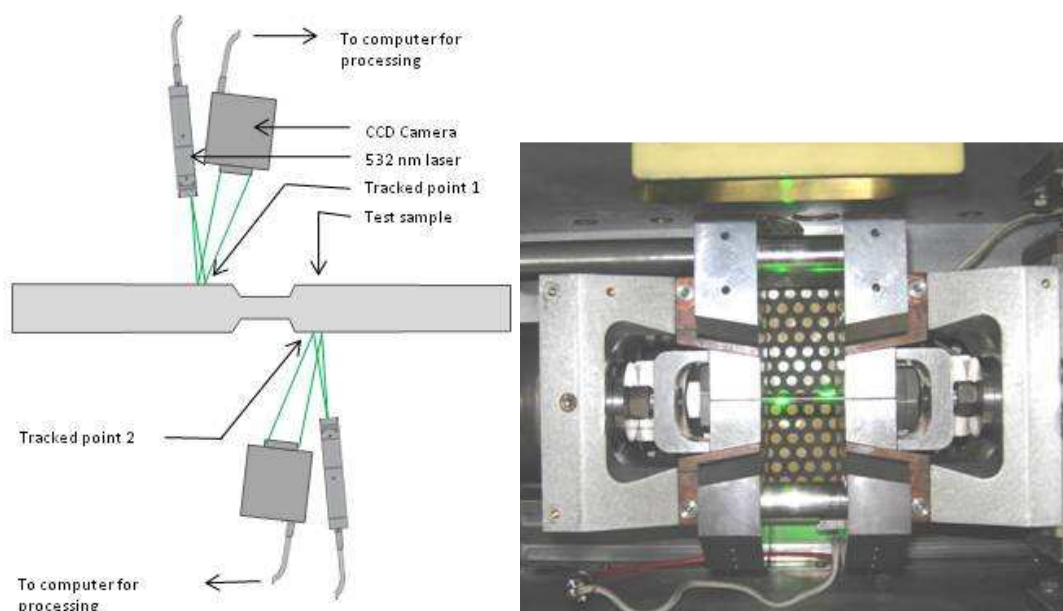


Figure 100 : dispositif expérimental d'un extensomètre laser: a) schéma de principe, b) photographie

B. *Le montage expérimental*

Pour être complète, la méthode de mesure doit prendre en compte le montage mécanique qui supportera l'ensemble des instruments. L'ensemble des composants déterminés, et la réalisation du montage ont été effectués par Ascometal. Il devait remplir le succinct cahier des charges suivant :

- Doit pouvoir s'adapter sur le simulateur, c'est-à-dire que la mesure doit pouvoir être réalisée dans la chambre d'inertage de la machine Gleeble
- Etre simple à monter et démonter pour ne pas empêcher d'autres utilisations de la machine
- Minimiser au maximum les vibrations dues aux moteurs de la machine

En réponses à ces problèmes, le montage présenté sur la Figure 101 a été imaginé et installé sur la Gleeble. Afin d'éviter au maximum les perturbations dues à la présence de deux lasers, les caméras et les lasers ont été placées face à face, chacune pointant sur une extrémité de la zone utile de l'éprouvette. L'ensemble du montage a été monté sur un solide bâti en acier pour minimiser les vibrations.

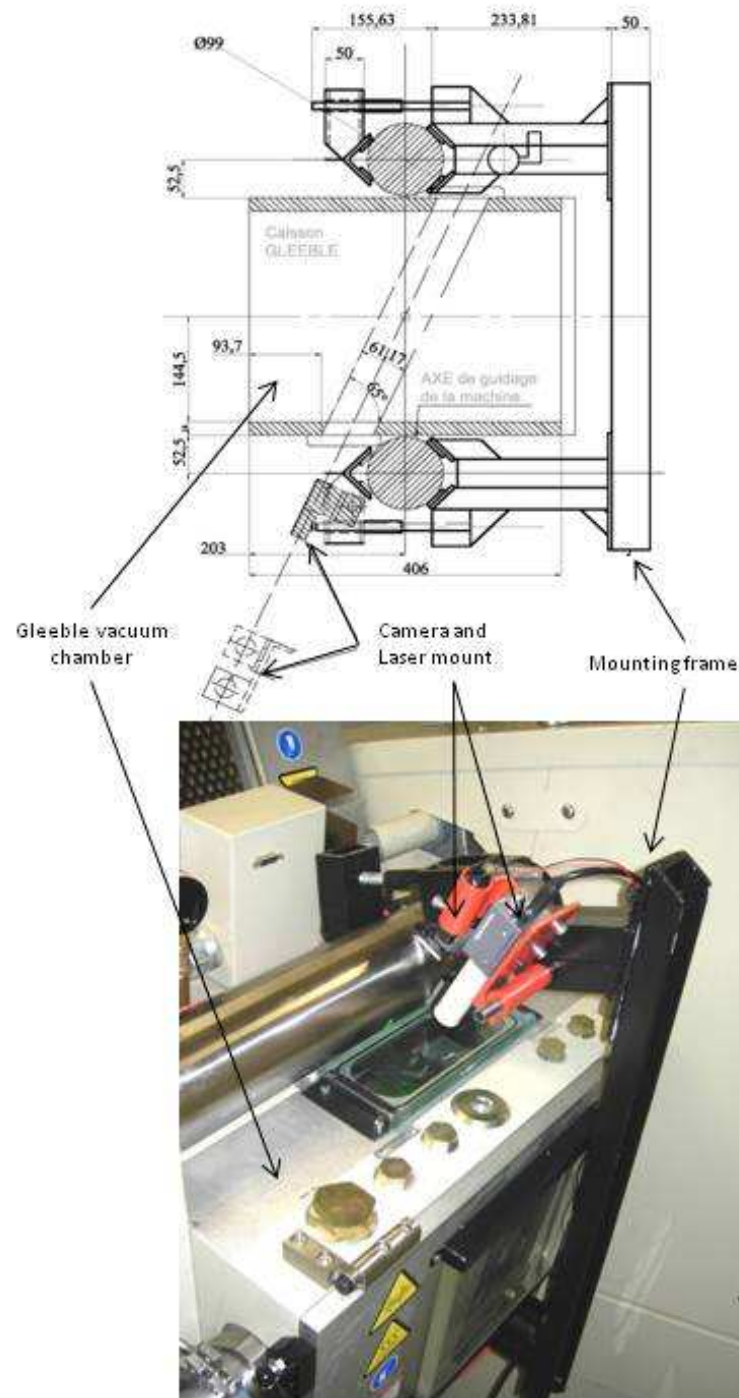
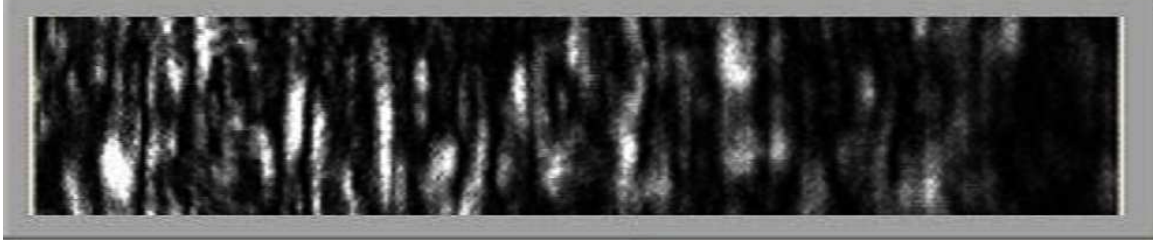


Figure 101 : Montage mis en place sur Gleeble 3800 (Ascometal) pour supporter l'extensomètre laser: a) schéma de principe, b) photographie

Malgré le fait d'avoir placé les caméras face à face, toutes les réflexions n'ont pu être supprimées. En effet, comme le montre la Figure 102, sur la caméra 2, bien que le laser qui lui est associé soit éteint, des speckles sont observés. Donc l'ajout de multiples caches dans le montage de la Gleeble a été nécessaire pour éviter les réflexions parasites.

caméra 1 : caméra ON, laser ON



caméra 2 : caméra ON, laser OFF

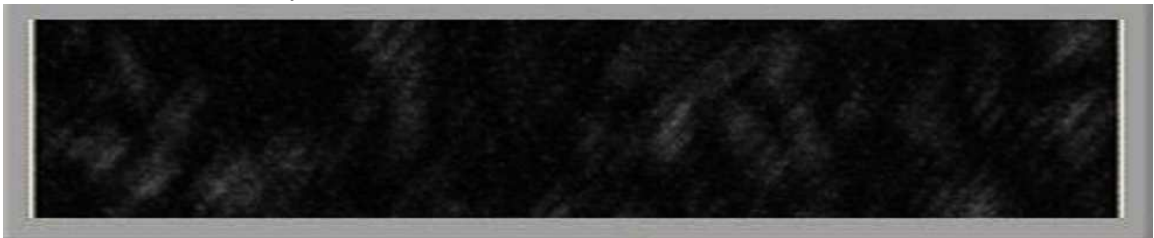


Figure 102 : enregistrement des deux caméras du montage dans le cas où le laser associé à la caméra 2 est arrêté. On observe néanmoins un speckle résiduel dû aux réflexions.

6.2 Validation

Ce montage qui utilise deux sources lasers et deux caméras nécessite impérativement que les caméras observent les mêmes déplacements si elles pointent sur la même zone de l'éprouvette. Pour vérifier cela, nous avons redirigé les deux caméras et les deux lasers pour les faire pointer vers le centre d'une éprouvette. Cette éprouvette a été fixée sur le mors mobile et laissée libre sur le mors fixe. Ainsi nous avons pu faire subir à l'éprouvette un ensemble de déplacements en translation.

Cet essai se décompose en une succession de translations. Il se compose de 11 paliers de 0,1 mm. La Figure 103 montre les résultats obtenus. Sur cette figure, on compare le signal enregistré par les deux caméras (caméra fixe et caméra mobile). La somme des deux signaux doit être nulle. On note que tout au long des déplacements, jusqu'au déplacement maximum de 1,1mm, les signaux enregistrés sont très proches. Les résultats obtenus s'avèrent satisfaisants, l'erreur maximum constatée étant de 0,013 mm ce qui représente une erreur maximale de 1%.

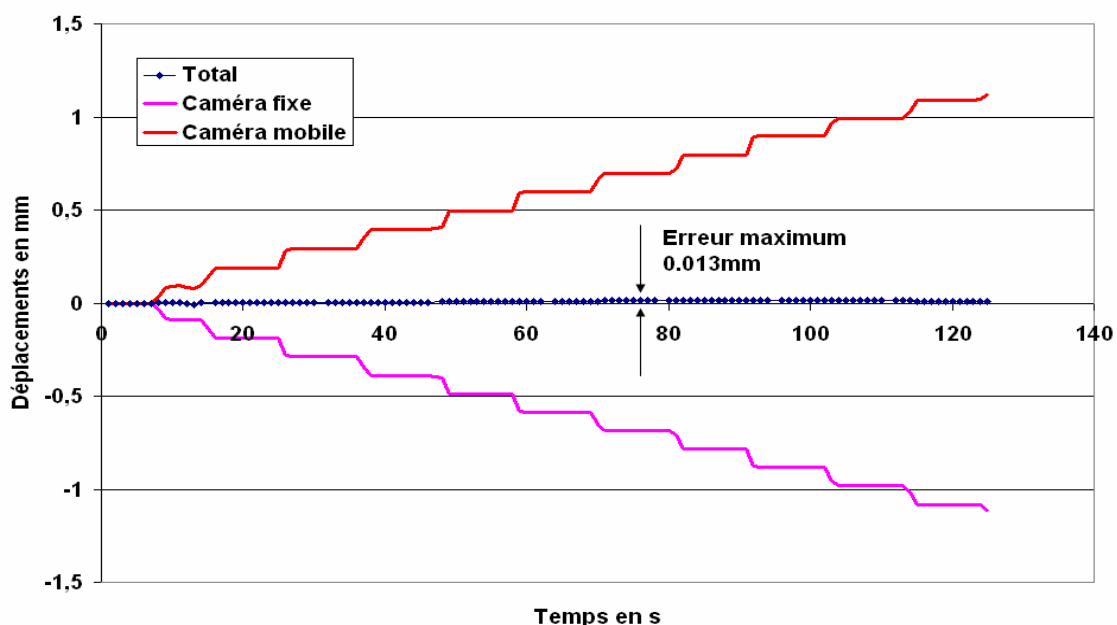


Figure 103 : résultats d'essais de translation obtenus par les deux caméras pointées sur le centre d'une éprouvette attachée sur le mors mobile. Les deux caméras (fixe et mobile) doivent en toute logique mesurer le même déplacement, ce déplacement est capturé positivement pour l'une négativement pour l'autre. Le total représente l'erreur de mesure.

La mesure d'un déplacement imposé via une vis micrométrique est l'autre essai classiquement utilisé pour valider des mesures. Un déplacement est imposé sur un échantillon à l'aide d'un micromètre numérique (MITUTOYO ID-H530 de précision +/- 1,5µm). Afin de limiter les erreurs de précision du micromètre la gamme de déplacement est de 0,2955 à 0,3 mm.

Mesures Mitutoyo	CAMERA 1			CAMERA 2		
	en pixels	en mm	Erreur en mm	en pixels	en mm	Erreur en mm
0,2955	129	0,29665107	0,00015107	135	0,29779452	0,00229452
0,2975	130	0,29794294	0,00044294	136	0,30000041	0,00250041
0,2965	129	0,29665107	-0,00084893	135	0,29779452	0,00129452
0,2975	130	0,29794294	0,00044294	136	0,30000041	0,00250041
0,296	130	0,29794294	0,00194294	134	0,29558864	-0,00041136
0,2975	131	0,30023481	0,00273481	135	0,29779452	0,00029452
0,297	131	0,30023481	0,00323481	133	0,29338275	-0,00661725
0,3	131	0,30023481	0,00023481	135	0,29779452	-0,00220548

Figure 104 : résultats d'essais de translation obtenus par les deux caméras pointées sur les deux bords de la zone utile d'une éprouvette attachée à une vis micrométrique

L'erreur maximale constatée entre la mesure du comparateur et la mesure caméra est de 3 µm.

7. Faisabilité d'essais haute température

Lors du choix de la technique de mesure, la principale difficulté provenait des conditions thermiques qui sont imposées sur les échantillons lors des essais. En effet, trouver des paramètres rhéologiques pour des aciers dans des conditions de soudage ou de solidification signifie mesurer des déplacements pour des températures supérieures à 1200°C. A ces températures, même si la technique employée ne nécessite plus l'application d'un mouchetis ou d'un motif sur l'éprouvette, elle est soumise à d'autres problèmes qu'il a fallu résoudre, au premier rang desquels les modifications de l'état de surface. En effet, les speckles étant la signature d'une surface rugueuse, tout changement dans la rugosité détériore la qualité du signal et donc les deux signaux se trouvent être décorrélés (Figure 82). Cette décorrélation peut être provoquée par un trop grand déplacement entre deux images, ou par des variations d'état de surface provenant soit d'un changement phase métallurgique soit de l'apparition d'oxydation due à la température. Les variations d'état de surface dus au changement de phase métallurgique sont des phénomènes ayant une cinétique lente et de plus lors d'essais à une température donnée, ce phénomène disparaît quasiment. Le principal problème reste donc l'apparition d'oxydation à chaud.

7.1 Changement de l'état de surface du à l'oxydation

Lorsqu'un acier tel que ceux de notre étude se trouve être au contact de l'air et plus particulièrement au contact de dioxygène, ce dernier s'adsorbe et réagit pour former une couche d'oxyde. Si ce phénomène est particulièrement long a température ambiante, il est activé thermiquement. Comme dans tout phénomène de « germination », une couche d'oxyde va se former en une certaine zone, puis celle-ci va croître rapidement jusqu'à recouvrir toute la surface. Ce phénomène est observé à la Figure 107, où l'on observe des premières taches d'oxyde à 900°C (ces taches sont mises en évidence par un changement de luminosité). A 1200°C, l'éprouvette est entièrement recouverte par cette couche d'oxyde. Cette couche d'oxyde qui n'adhère pas toujours à l'éprouvette est fragile et va avoir tendance à craqueler ou à s'écailler sous l'effet d'une action mécanique.

La présence d'une couche d'oxyde rend très difficile le suivi d'un mouchetis laser et donc la mesure des déplacements. Si on regarde de plus près la Figure 107 et plus particulièrement l'image prise à 1200°C, on voit que l'état de surface de l'éprouvette a été totalement modifié, changeant profondément la structure du speckles. Lorsque la couche d'oxyde continue à croître au point de pouvoir changer la profondeur de champ de l'image et donc de modifier la mise au point les images sont inutilisables pour un post traitement. En effet d'une part du fait du changement d'état de surface au cours du temps il y a décorrélation entre deux même zones sur deux images successives. La Figure 105 montre l'effet de l'oxydation sur l'analyse des déplacements lors d'un essai de traction à chaud. On constate que, dès lors qu'une zone est oxydée, sa surface varie très rapidement ce qui rend impossible l'analyse du déplacement.

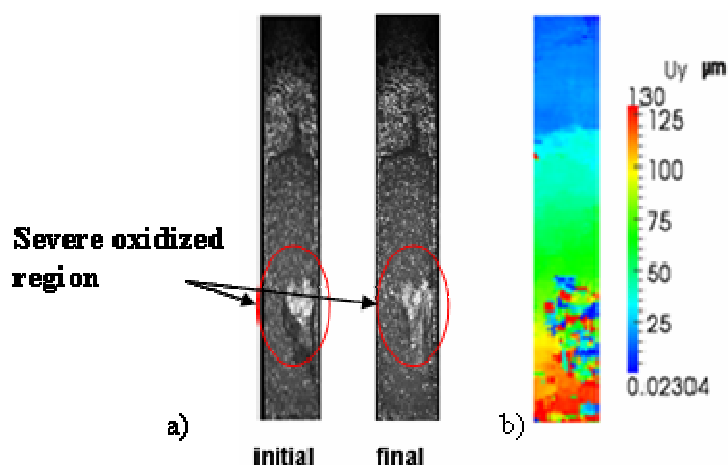


Figure 105 : champ de déplacement entre deux images consécutives prises lors d'un essai de traction. La zone cerclée de rouge a) montre une région particulièrement oxydée, dans cette zone la corrélation d'image s'avère être très difficile b)

D'autre part, même quand l'état de surface de la couche d'oxyde ne change plus, car l'oxyde a tendance à ne pas adhérer à la surface du métal de base de l'éprouvette, les déplacements mesurés sur une couche d'oxyde ne traduisent pas de manière réaliste les déplacements de la matière se trouvant en dessous du métal de base.



Figure 106 : éclatement de la couche d'oxyde sur une éprouvette Gleeble (100Cr6, Température 1200°C)

L'utilisation d'un gaz inerte servant de protection contre l'oxydation s'avère donc nécessaire. Plusieurs types de gaz peuvent être utilisés, l'argon ou un mélange d'argon et d'hydrogène (5% d'hydrogène) étant les plus classiques.

L'utilisation de ce mélange argon/hydrogène a été testé sur des échantillons chauffés à 1300°C. Sur la Figure 108, on remarque que l'utilisation d'un gaz inerte composé d'argon et d'hydrogène empêche toute apparition d'oxyde, et par conséquent la figure de speckles reste totalement exploitable.

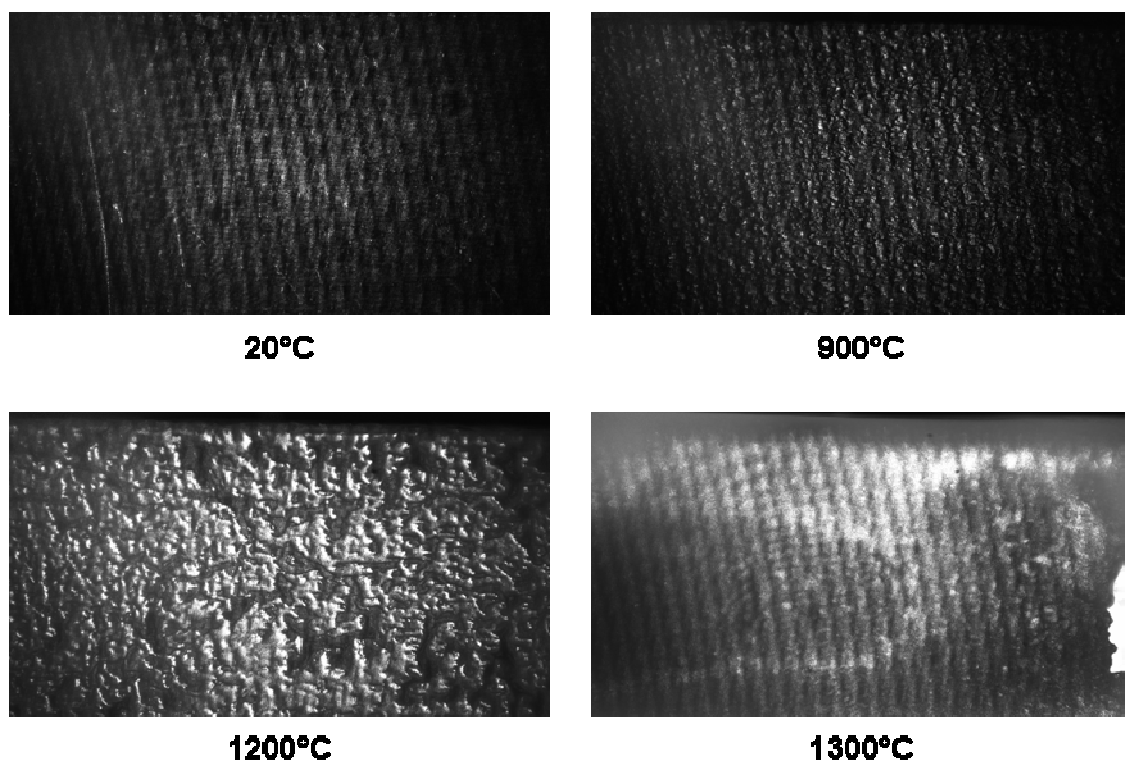


Figure 107 : figure de speckles pour des températures allant de 20°C à 1300°C. Essai réalisé à l'air libre.

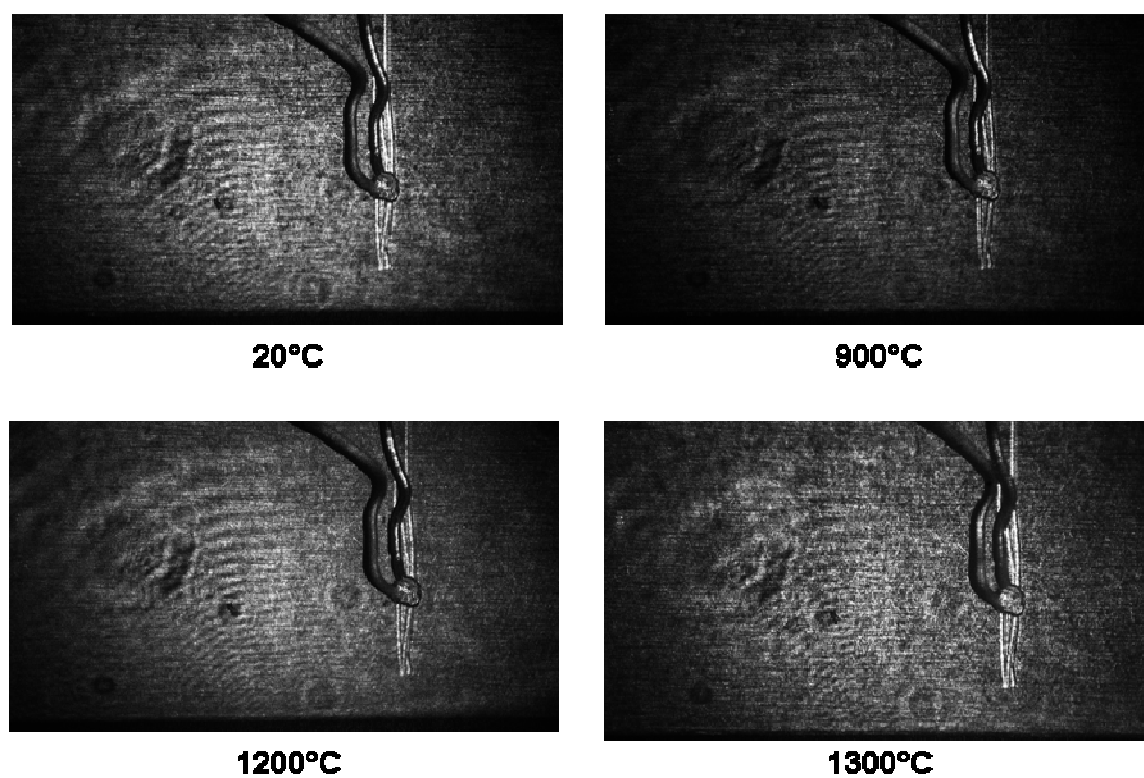


Figure 108 : figure de speckles pour des températures allant de 20°C à 1300°C. Essai réalisé sous atmosphère contrôlée (Ar+5%H)

Des observations similaires sur l'état de surface ont été réalisées sur éprouvettes Gleeble chauffées à 1200°C et 1300°C pendant 5 min, avec comme le montre la Figure 109. Des résultats très satisfaisants en terme d'état de surface ont également été obtenus.

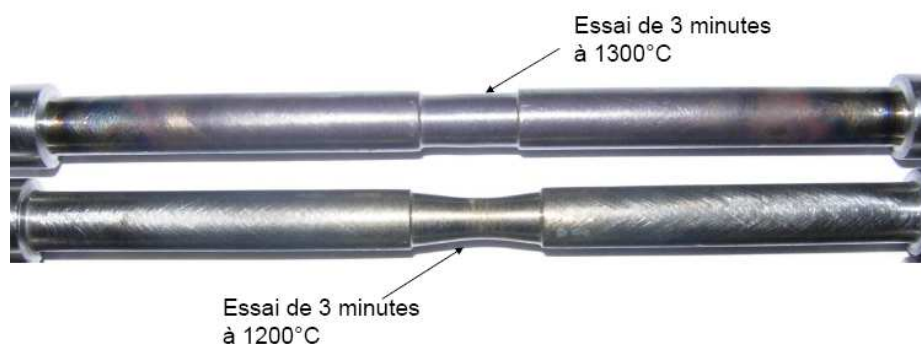


Figure 109 : état de surface d'éprouvettes Gleeble chauffées pendant 3 min à 1200°C et 1300°C sous atmosphère protectrice.

Néanmoins, l'utilisation d'un mélange argon-hydrogène n'est pas totalement anodine, en effet l'hydrogène a pour inconvénient de fragiliser les aciers. L'hydrogène diffuse dans l'acier produisant des zones de fragilisation. Et l'hydrogène tend à diffuser plus rapidement à haute température et sous contraintes mécaniques [Coudreuse 00], ce qui est notre cas. Mais ce phénomène est particulièrement long quand l'atmosphère n'est pas saturée avec une forte concentration d'hydrogène [Ropital 09]. Pour vérifier cela, nous avons comparé via des mesures de micro dureté les zones affectées par l'hydrogène avec des mesures réalisées sur des aciers n'ayant pas été au contact de l'hydrogène. Sur la Figure 110, on note que la zone affectée en surface (zone blanche sur la surface) des éprouvettes a une très faible profondeur (environ 20 microns).

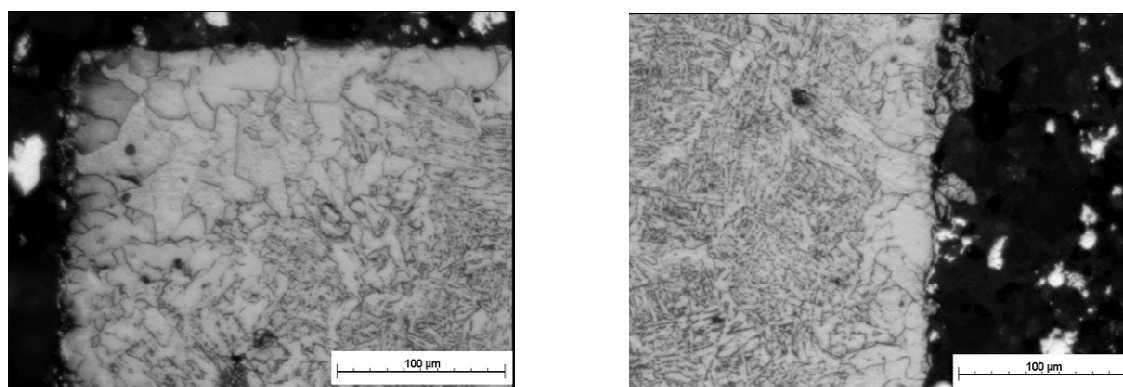


Figure 110 : observation au microscope de l'influence d'un inertage argon+hydrogène sur des éprouvettes Taboo. A gauche: image prise dans le coin, à droite : image prise sur la face.

Ces observations au microscope ont pu être validées par des mesures de microduretés. Deux échantillons ont été chauffés, un sous atmosphère contrôlée, l'autre non. Ascometal réalise tous ses essais sous un mélange l'argon+Hydrogène (5% d'hydrogène) pour des essais qui ont une durée similaire à ceux réalisés dans la présente étude. Comme le montre la Figure 111 nous avons pu comparer les duretés entre elles, ainsi qu'avec l'état initial.

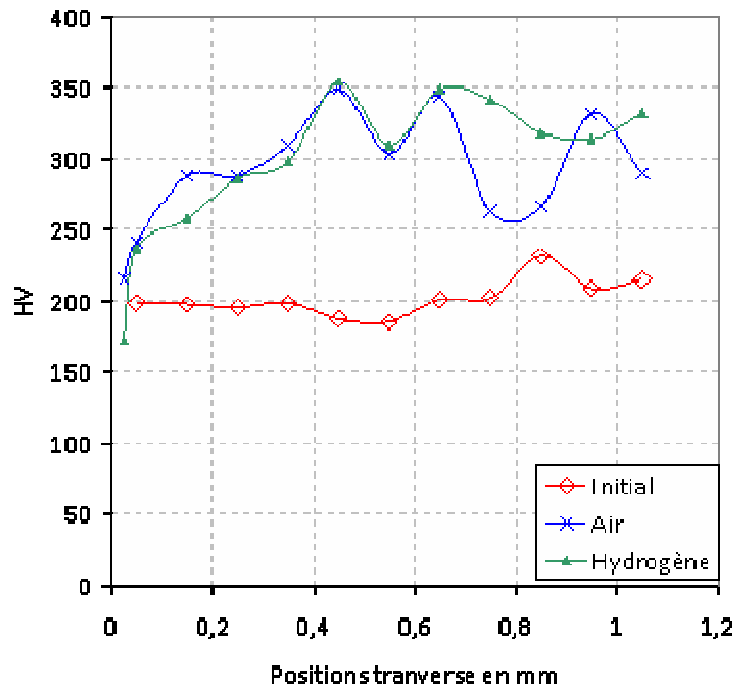


Figure 111 : évolution de la dureté en fonction de la position transverse pour trois éprouvettes différentes (DP780), deux chauffées à 1200°C soit sous atmosphère protectrice, soit à l'air libre et une troisième éprouvette dans l'état initial.

8. Application aux essais à chaud

Des essais réalisés sous atmosphère contrôlée Argon-Hydrogène se sont avérés très satisfaisants. En effet l'utilisation de tel gaz pouvait laisser craindre des mouvements d'air chaud le long de l'éprouvette, pouvant créer du bruit sur les speckles et donc nuire à la qualité des mesures. Si cela a pu être observé pour un fort inertage, la diminution du débit durant l'essai après une période de 5 min durant laquelle l'enceinte est saturée en gaz inerte, permet de limiter considérablement les mouvements d'air le long de l'éprouvette et éviter une grande partie de l'oxydation. Et donc comme le montre la Figure 112, il est possible de remonter à des champs de déplacement à haute température.

8.1 Résultats d'essais Taboo :

Nous avons pu appliquer les speckles à des essais Taboo à haute température. Nous présentons ici le résultat d'un essai de traction monotone à 1200°C. Nous imposons sur l'éprouvette une vitesse de traverse de 0,05 mm/s pendant 20 secondes.

La zone de mesure sur l'éprouvette est représentée par le cadre rouge sur la Figure 112. Ce cadre représente une zone de 10 mm de long et de 6 mm de large (la totalité de la largeur de l'éprouvette). Sur cette zone nous observons une figure de speckles.

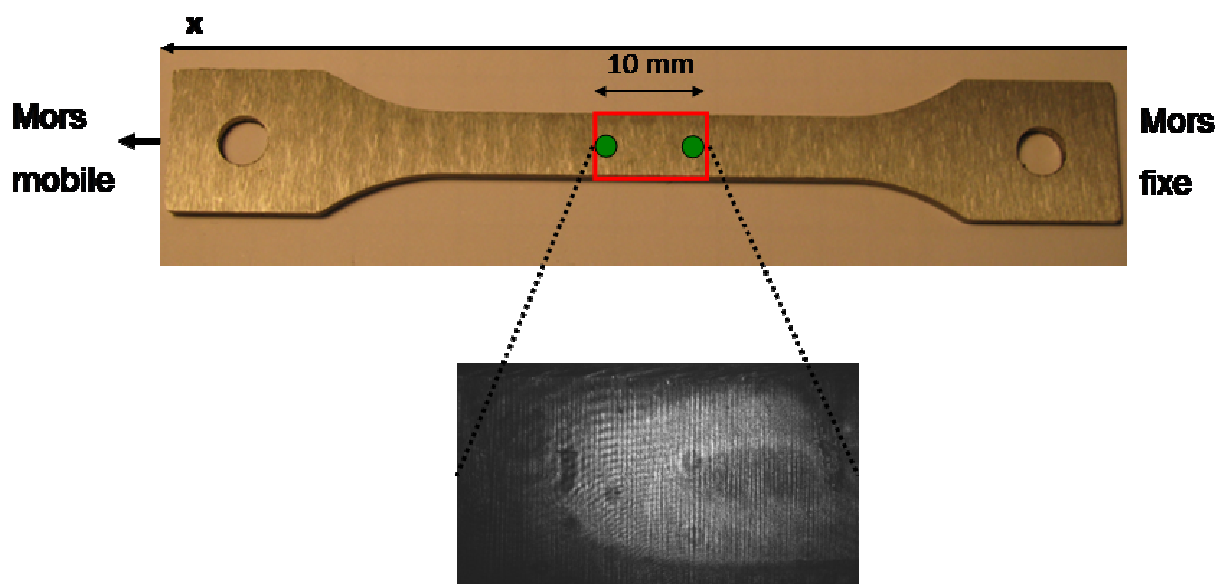


Figure 112 : en haut : le cadre rouge représente la zone où est réalisée la mesure de champ, les deux points verts représentent les zones de mesure pour le système dit « extensomètre ». En bas la figure de speckles enregistrée lors de l'essai à 1200°C.

Sur cette zone de mesure, nous pouvons déduire un champ de déplacement ou bien réaliser une mesure de type extensomètre entre deux points (points verts). La mesure extensomètre permet de connaître à tout instant l'allongement existant entre les deux points de mesure.

En plus de ces mesures locales de type extensomètre, nous pouvons compléter l'information obtenue en utilisant les cartes de déplacement. Ces cartes peuvent être obtenues à tout moment au cours de l'essai, avec, comme le montre la Figure 113 des niveaux de déplacement qui peuvent être faibles. Cette carte de déplacement est obtenue après 3 secondes d'essai.

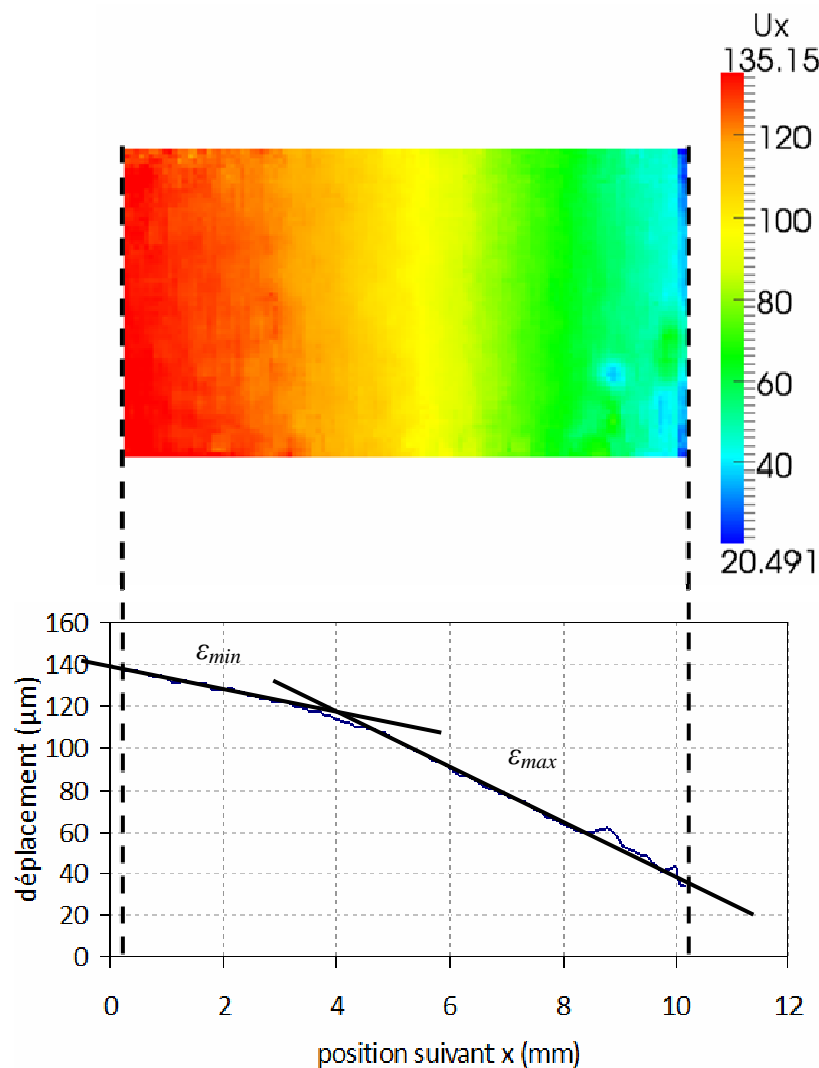


Figure 113 : Champ de déplacement mesuré dans la zone centrale d'une éprouvette de traction à 1200°C

On note qu'à $t=3s$, le déplacement du mors mobile est de 150 μm . Sur la zone étudiée l'allongement n'est que 105 μm ce qui signifie que malgré le gradient thermique l'éprouvette se déforme aussi en dehors de la zone centrale. De plus, comme le montre les calculs présentés ci-dessous, on note que sur la zone étudiée, la déformation (gradient du champ de déplacement) n'est pas homogène sur toute la zone d'étude.

En considérant que la totalité de la déformation soit concentrée dans la zone centrale, la déformation ϵ_{nom} serait de 0,015, alors que dans le cas présent elle n'est que de 0,105. Sur la zone speckles on peut distinguer un $\epsilon_{min}=0,005$ et $\epsilon_{max}=0,015$.

L'existence de ce gradient thermique est rappelée par la **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**, sur cette figure on présente le gradient thermique dans une zone de 30 mm autour du centre de l'éprouvette (15 mm de part et d'autre du centre).

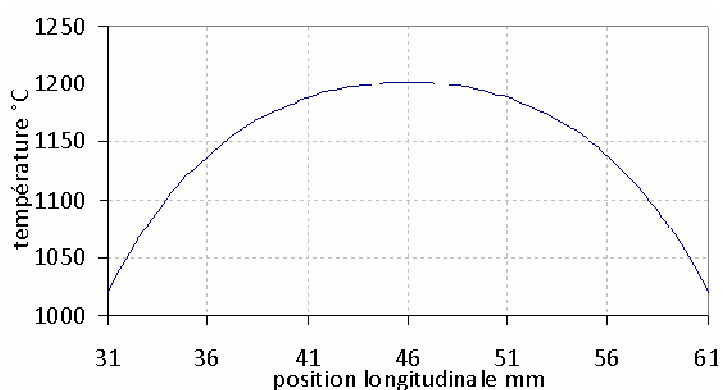


Figure 114 : profil thermique longitudinal dans une zone de 30mm de long autour du centre de l'éprouvette. Ce profil est obtenu par simulation numérique

Ce résultat peut être confirmé en comparant tout au long de l'essai la mesure de type extensomètre laser pratiquée au niveau les deux « spots » verts avec la mesure de déplacement de la partie mobile de Taboo, à l'aide d'un capteur LVDT placé sur la colonne mobile de Taboo. Ainsi nous présentons, comme le montre la Figure 115, l'allongement de la partie centrale de l'éprouvette au cours de cet essai.

On remarque que malgré le fort gradient thermique qui existe le long des éprouvettes, le déplacement n'est pas simplement concentré sur la zone centrale de l'éprouvette et ce tout au long de l'essai. Ainsi l'allongement de la zone centrale ne représente qu'environ 2/3 de l'allongement total de l'éprouvette.

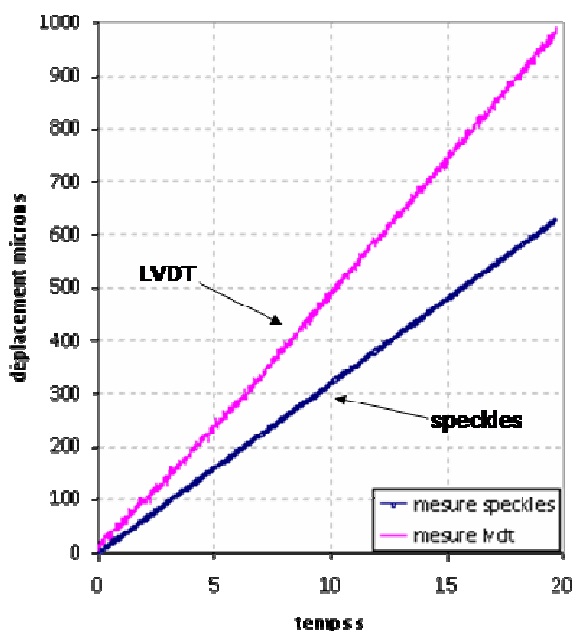


Figure 115 : comparaison de l'évolution de l'allongement de la zone centrale (mesure speckles) et du déplacement mesuré par le capteur LVDT.

Ce que nous pressentions lorsque nous avons choisi de développer une mesure locale, se vérifie ici, à savoir une mesure globale ne suffit pas. Malgré la présence d'un gradient thermique on ne peut pas imputer le déplacement des mors à la seule déformation de la zone « chaude » de l'éprouvette. C'est-à-dire la partie centrale de l'éprouvette qui est la plus chaude, et où le gradient thermique est assez faible. Ainsi dans un essai Taboo (mais on a vu que c'était aussi le cas pour des éprouvettes Gleeble), on ne peut mettre en évidence une vraie « zone utile » dont la longueur servirait à normaliser le déplacement des mors pour obtenir une estimation de la déformation.

On retrouve la différence d'allongement de la Figure 115 dans les courbes force/allongement (ou déplacement) de la Figure 116. L'écart entre les courbes est sensible

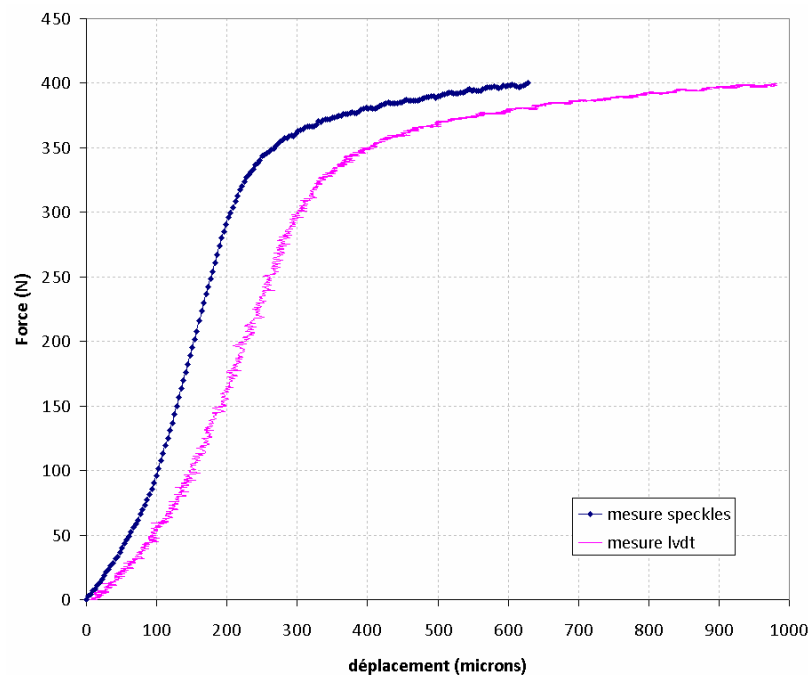


Figure 116 : comparaison des courbes force-déplacement et force-allongement obtenues par les deux méthodes de mesure.

En conclusion, on voit dans ce paragraphe tout l'intérêt d'une mesure locale du déplacement, car, imputer tout le déplacement des mors à la seule zone utile nous amènerait à commettre des erreurs trop importantes dans l'analyse des résultats.

8.2 Résultats essais Gleeble :

Sur Gleeble des essais de traction ont permis d'obtenir les résultats présentés ci-dessous. Durant ces essais l'échantillon a été chauffé à 1000°C et a subi une série de traction par palier de 0,1mm chacun. En plus de la mesure speckles, un signal vérin et un signal extensomètre mécanique ont été enregistrés. Les tiges alumine de cet extensomètre sont fixées de chaque côté de la zone utile sur les congés de raccordement. La mesure réalisée par speckles s'apparente à une mesure de type extensomètre. En effet les deux lasers

permettent de créer un extensomètre virtuel. Afin de permettre une comparaison entre extensomètre laser et extensomètre mécanique, ceux-ci ont été placés très proche l'un de l'autre (Figure 119). Comme dans le cas de Taboo, on observe (Figure 117) une dérive de la mesure vérin par rapport à la mesure locale. En effet, l'allongement déduit de la mesure extensomètre mécanique ou la mesure speckles sont inférieures à la mesure donnée par le déplacement du vérin. Ceci traduit ici aussi que les déformations hors zone centrale ne sont pas négligeables. Par contre le déplacement mesuré par les speckles et par l'extensomètre sont très proches l'un de l'autre.

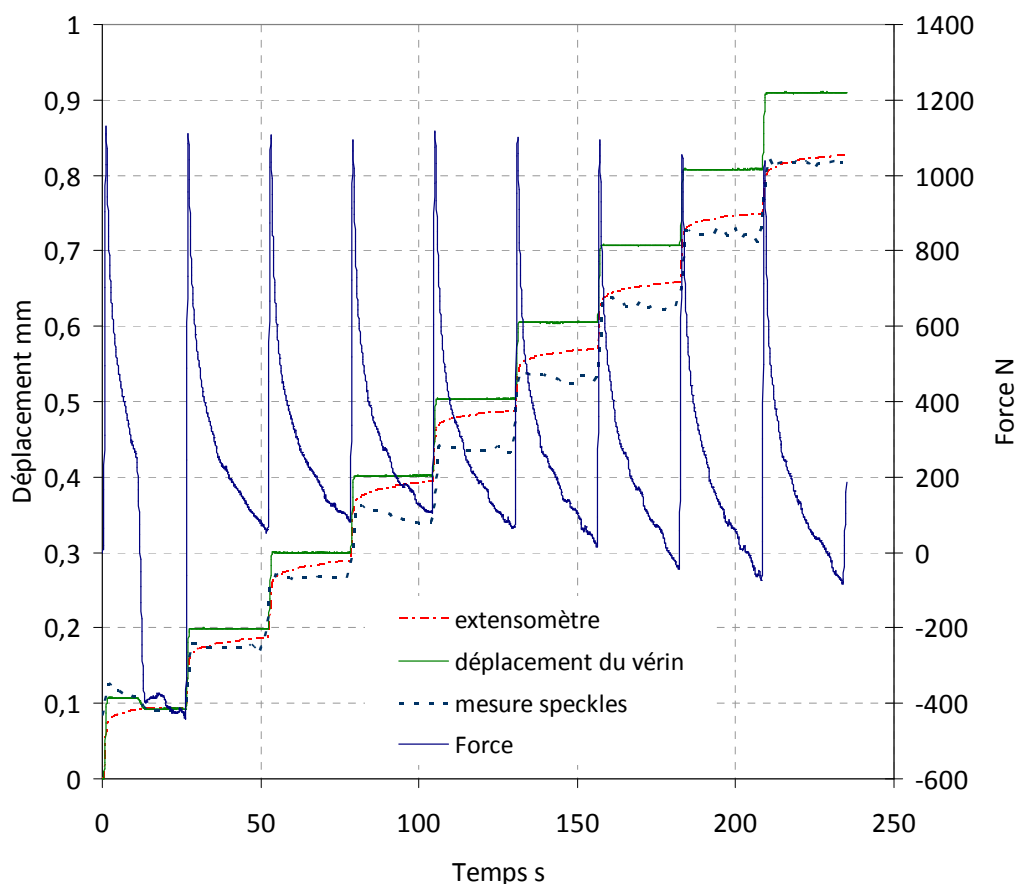


Figure 117 : comparaison de déplacements mesurés par trois types de mesure (déplacement vérin, extensomètre mécanique et speckles) lors d'un essai de traction Gleeble à 1000°C

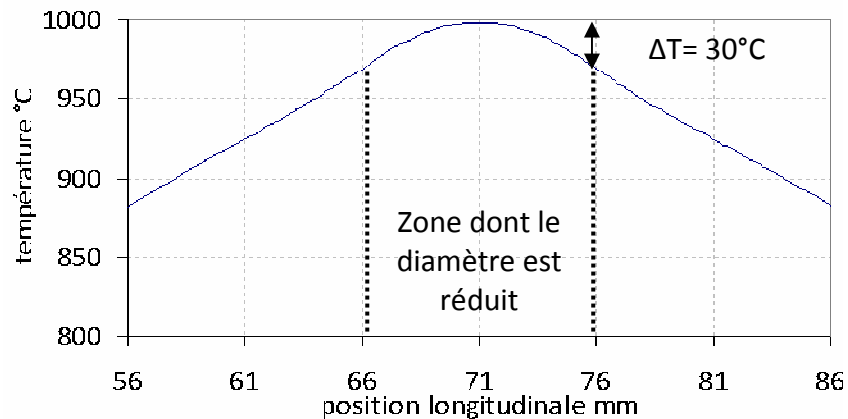


Figure 118 : profil thermique dans une zone de 30mm de long autour du centre de l'éprouvette. Ce profil est obtenu par simulation numérique

On remarque néanmoins de petites différences dans l'évolution lors des périodes de relaxation. Il semblerait que ces différences proviennent principalement du fait que l'extensomètre soit très fortement filtré, ce qui explique le fait que l'extensomètre à $t=10s$ n'ait pas observé de déplacement alors que les speckles et les mors en aient observé un. Mais le principal intérêt des speckles n'est pas là, à la différence de l'extensomètre mécanique, l'extensomètre speckles est capable de mesurer des déplacements pour des températures supérieures à $1000^{\circ}C$.

Là encore on peut regarder de plus près la différence entre une mesure locale et globale. Ce point s'avère d'autant plus intéressant sur Gleeble, que comme le montre la Figure 119, la géométrie choisie à une "vraie zone utile" de diamètre 6 mm inférieur du reste de l'éprouvette (7 mm). Cette zone utile comme le montre la Figure 118 est une zone concentrant la densité de courant et donc plus chaude. Et, malgré cela, la zone utile de l'éprouvette n'est pas la seule affectée par la déformation, comme on peut le constater en comparant les courbes force-déplacement des mors et force allongement speckles. Le reste de l'éprouvette se déforme également.

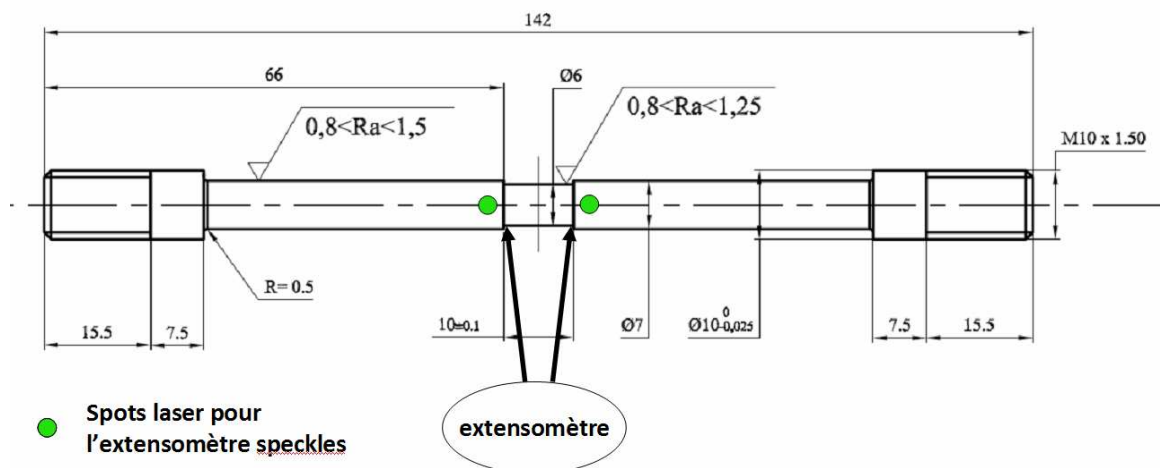


Figure 119: Géométrie d'une éprouvette Gleeble utilisée pour les tests. En vert sont repérées les taches laser de l'extensomètre virtuel. Les deux flèches donnent la position de l'extensomètre mécanique.

Une première conclusion peut être tirée de ce qui précède, l'extensomètre speckles fonctionne à haute température et offre des résultats comparables à ceux donnés par un extensomètre mécanique, à la différence près que l'extensomètre speckles ne sera pas limité à une température maximale de 1000°C et se monter beaucoup plus versatile et complet.

La seconde conclusion pouvant être faite sur l'utilisation de cette mesure locale lors d'essais Gleeble est sensiblement la même que celle faite pour Taboo. On voit clairement qu'une mesure de déplacement faite au niveau des vérins n'est pas suffisante puisque la déformation n'est pas concentrée dans la zone utile.

9. Conclusions

En conclusion de ce chapitre sur les développements que nous avons menés pour la mesure des déplacements par méthode de speckles laser nous retiendrons les points suivants :

1. Nous avons proposé sur la base de la littérature existante, un nouvel algorithme innovant et performant pour mesurer des champs de déplacement. Cet algorithme (CC-CS) couple une méthode classique d'inter corrélation avec une méthode interspectre. Cet algorithme a pu être appliqué sur une mesure par speckles laser.
2. Le principe de la mesure a été décliné en deux méthodes. L'une est orientée mesure de champ, c'est celle que nous utilisons pour les essais Taboo. L'autre est orientée « extensométrie virtuelle », applicable aux essais Taboo, mais surtout développée pour les éprouvettes cylindriques de type Gleeble. De ce point de vue, nous avons eu l'opportunité de mettre en place et d'animer un « transfert de technologie » très rapide entre le Cemef et les équipes Ascométal-Creas.
3. Nous avons aussi apporté des solutions à la problématique des hautes température, de par la méthode elle-même (mesure sans contact) mais aussi en résolvant les problèmes d'oxydation. L'utilisation d'un gaz inerte type argon-hydrogène a été rendue possible lors de ces essais parce que la durée des essais était relativement courte. Lors d'essais plus longs, l'effet de l'hydrogène pourrait se faire sentir sur la fragilité des aciers.
4. Pour Ascometal ou pour le Cemef, l'utilisation de ces méthodes s'avère très nouvelle. Elles ont été développées sur une période relativement courte au regard de ce qu'ont pu faire d'autres laboratoires tel que le LMT Cachan avec Correli où un groupe de recherche se focalise uniquement sur les problématiques mesure de champ. Mais si ces méthodes, tant d'un point de vu méthode de mesure qu'analyse avec l'algorithme CC-CS, s'avèrent très prometteuses, elles ne sont pas parfaites, et nécessiteront d'autres développements. En ce qui concerne les pistes d'amélioration et les perspectives on retiendra principalement des améliorations possibles en traitement du signal comme par exemple sur le filtrage du signal pour diminuer le bruit de mesure ou bien encore l'ajout d'un taux de décorrélation qui nous permettrait d'avoir un indice de fiabilité des mesures. Et enfin cette méthode permettant l'analyse en seulement 2 ms d'une zone 512 x 512 pixels, on peut très bien imaginer de traiter en continue certaines zones et ainsi de piloter un essai mécanique en se servant de la mesure speckles.

Bibliographie

- [Aime01] : C. Aime, (2001), Teaching Astronomical Speckle Techniques , *European Journal of Physics*, **22**, pp.196.
- [Avril02] : S. Avril, (2002), Application des méthodes de mesure de champs à la caractérisation mécanique des poutre de béton armé réparées par matériaux composites, thèse de doctorat, *Ecole Nationale des Mines de Saint Etienne*.
- [Anwander2000] M. Anwander, B. Zagar, B. Weiss, and H. Weiss, (2000), Noncontacting strain measurements at high temperatures by the digital laser speckle technique *Experimental Mechanics*, **40**, pp 98-10
- [Badulescu09] : C. Badulescu, M. Grédiac, J. Mathias, D. Roux, (2009), A procedure for accurate one dimensional strain measurement using the grid method , *Experimental Mechanics*, **48**, pp.841.
- [Brandt69] : G.B. Brandt, (1969), Image Plane Holography , *Applied Optics*, **8**, pp.1421.
- [Chambon03] : S. Chambon, A. Crouzil, (2003), Dense matching using correlation: new measures that are robust near occlusions , *Proceedings of British Machine Vision Conference, East Anglia, Norwich, UK*, **1**, pp.143.
- [Chen93] : D. Chen, F. Chiang, H. Tan, Y.S.and Don, (1993), Digital speckle displacement measurement using a complex spectrum method , *Applied Optics*, **32**, pp.1839.
- [Chiang97] : F. Chiang, Q. Wang, F. Lehman, (1997), New Developments in Full Field Strain Measurements Using Speckles , *ASTM STP Nontraditional Methods of Sensing Stress, Strain, and Damage in Materials and Structures*, **1318**, pp.156.

- [Chu83] : T. Chu, M.A. Ranson, W.F. and Sutton, W. Peters, (1983), Applications of Digital Image Correlation Technique to Experimental Mechanics , *Experimental Mechanics*, **6**, pp.738.
- [Coudreuse00] : L. Coudreuse, A. Brass, J. Chene, (2000), Fragilisation des aciers par l'hydrogène : mécanismes , *Techniques de L'Ingénieur*, **M176**, .
- [Dahan08] Y. Dahan,(2008), Hot Formability of quenchable steel sheets,thèse de doctorat en Sciences et Génie des Matériaux, MINES ParisTech.
- [Duffy72] : D.E. Duffy, (1972), Moiré Gauging of in Plane Displacement using double Aperture Imaging , *Applied Optics*, **11**, pp.1778.
- [Gabor49] : D. Gabor, (1949), Microscopy by reconstructed wavefronts , *Proceedings of Royal Society A*, **197**, pp.454.
- [Goodman85] : J. Goodman, (1985), Statistical Optics , *Wiley, Sons* , Wiley classic library.
- [Hild99] : Hild, F., Périé, J. and Coret, M. (1999). Mesure de champs de déplacement 2D par corrélation d'images numériques: CORRELI., LMT Cachan.
- [Huang07] : H. Huang, A. Waas, (2007), Improved speckle method for measuring in plane displacement and strain fields , *Optical Engineering*, **46**, pp.051005.
- [Hung75] : Y. Hung, R. Rowlands, I. Daniel, (1975), Speckle-Shearing Interferometric Technique: a Full Field Strain Gauge , *Applied Optics*, **14**, pp.618.

- [Iris] Iris Techno,. Moncel-le`s-Lunéville, France
- [Knockaert01] : R. Knockaert, (2001), Etude Expérimentale et Numérique de la Localisation de la Déformation lors de la Mise en Forme de Produits Minces, thèse de doctorat, *Mines-ParisTech*.
- [Labeyrie70] : A. Labeyrie, (1970), Attainment of diffraction-limited resolution in large telescopes by Fourier-analyzing speckle patterns in star images , *Astronomy and Astrophysics*, **6**, pp.85.
- [Lokberg85] : O. Lokberg, J. Malmo, G. Slettemoen, (1985), Interferometric Measurements of High Temperature Objects by Electronic Speckle Pattern Interferometry , *Applied Optics*, **24**, pp.3167.
- [Molin04] : N. Molin, P. Sjödaahl, M.and Gren, A. Svanbro, (2004), Speckle Photography Combined with Speckle Interferometry , *Optics and Laser in Engineering*, **41**, pp.673.
- [Oppenheim99] : A. Oppenheim, (1999), Discrete-Time Signal Processing , Prentice Hall.
- [Patorski86] : K. Patorski, M. Kujawinska, (1986), Two way gratings for strain analysis using moiré and moiré interferometry techniques , *Applied Optics*, **25**, pp.1105.
- [Pan2011] Pan, B.; Wu, D.; Wang, Z. & Xia, Y., (2011), High-temperature digital image correlation method for full-field deformation measurement at 1200 degrees C, *Measurement science & technology*, **22**

- [Peters82] : W. Peters, W.H. and Ranson, (1982), Digital imaging techniques in experimental stress analysis , *Optical Engineering*, **21**, pp.427.
- [Petrov82] : R. Petrov, F. Kadiri, S. and Martin, C. Ricort, G. and Aime, (1982), Application de l'analyse interspectrale à la speckle interférométrie , *Journal of Optics*, **13**, pp.331.
- [Polster69] : H.D. Polster, J. Pastor, R.M. Scott, R. Crane, P. Langenbeck, R. Pilston, G. Steinberg, (1969), New developments in interferometry , *Applied Optics*, **8**, pp.521.
- [Post00] : D. Post, B. Han, P. IfJu, (2000), Moiré Methods for Engineering and Science – Moiré Interferometry and Shadow Moiré , *Photomechanics*, **77**, pp.151.
- [Ropital09] : F. Ropital, (2009), Corrosion et dégradation des matériaux métalliques , *T. Edition* , IFP Publications.
- [Sjoedahl98] : M. Sjö Dahl, (1998), Some recent advances in electronic speckle photography , *Optics and Laser in Engineering*, **29**, pp.125.
- [Sjoedahl97] : M. Sjö Dahl, (1997), Robustness of objective and subjective speckle patterns in the speckle strain gauge , *Optical Review*, **4**, pp.270.
- [Surrel00] : Y. Surrel, (2000), Fringe Analysis , *Photomechanics*, **77**, pp.55.
- [Sutton00] : M.A. Sutton, S. McNeill, J. Helm, Y. Chao, (2000),

Advances in two dimensional and three dimensional computer vision , *Journal of Applied Physics*, **77**, pp.323.

[Theocaris69] : P. Theocaris, (1969), *Moiré Fringes in Strain Analysis* , Oxford , Pergamon.

[Triconnet07] : K. Triconnet, (2007), Identification des propriétés mécaniques à partir de mesures de champs dans un matériau multi-phase, thèse de doctorat, *Arts et Métiers Paris-Tech*.

[Vautrin02] : A. Vautrin, J. Lee, J. Molimard, Y. Surrel, (2002), Full-field optical techniques: Application to strain measurement and mechanical identification. , *Proceedings of the ECCM-10. Brugge*, **CD edition** , .

[Volkl2004] R. Volkl, B. Fischer, (2004), Mechanical testing of ultra-high temperature alloys, *Experimental Mechanics*, **44**, pp121-127

[Yang07] : G. Yang, K. Wu, (2007), Principles and research of a high accuracy digital image correlation measurement system , *Optical Engineering*, **46**, pp.051006.

Chapitre 5 : Analyse inverse et Caractérisation Mécanique

Nous nous proposons dans ce chapitre de faire une étude bibliographique des méthodes numériques applicables à l'identification de paramètres rhéologiques par analyse inverse. Le but de l'analyse inverse est de déterminer des paramètres difficilement observables, ces paramètres sont issus d'essais simples. Les méthodes inverses sont divisées en deux grandes classes, l'estimation d'une fonction ou l'identification de paramètres.

L'ensemble des problèmes inverses se base sur des données expérimentales. On se trouve donc souvent confronté à des problèmes mal posés ou à des corrélations trop fortes entre les paramètres.

Le problème inverse est souvent exprimé sous la forme d'un problème d'optimisation (au sens des moindres carrés par exemple), qui vise à minimiser une fonction coût ou fonction objectif. Différentes méthodes existent pour la minimisation de la fonction coût. Parmi ces méthodes, on distingue deux grandes classes, les méthodes d'ordre zéro et les méthodes à direction de descente (type gradient).

En collaboration avec la thèse de Emile Roux [Roux 10] nous avons contribué au développement d'un module d'analyse inverse. Comme nous le verrons en perspective ce module conduira à terme à une méthode de recalage par éléments finis.

Le module d'analyse inverse a pu être utilisé pour identifier les paramètres rhéologiques des nuances étudiées dans le cadre de la thèse et plus particulièrement sur nos essais Taboo.

1. Méthodes de minimisation de la fonction coût

Une étude complète des méthodes de minimisation peut être trouvée dans la thèse de Romain Forestier [Forestier04].

1.1 Les méthodes d'ordre zéro

A. Algorithme du simplexe

C'est une méthode introduite par Nelder et Mead [Nelder 1965]. Il s'agit d'un algorithme efficace pour résoudre des problèmes de programmation linéaire (ou pour trouver qu'il n'y a pas de solution). On définit le simplexe comme un polygone possédant $N+1$ sommets, où N est le nombre de paramètres.

Cette méthode est beaucoup utilisée pour la recherche de minimum d'une fonction coût non différentiable. Voyons schématiquement comment opère cette méthode :

Choisir une solution réalisable dans la base (sommet du polygone)

- Si la fonction objectif a une valeur supérieure à un sommet voisin, alors aller à ce sommet
- Répéter (tant que possible...)

Chaque arête parcourue augmente la fonction objectif: donc pas de boucles. De plus, le nombre de sommets étant fini, le calcul doit se terminer. Enfin comme il n'existe pas de maximaux locaux qui ne soient des maximaux globaux, l'algorithme ne peut s'arrêter que sur une solution optimale si celle-ci existe.

Néanmoins, pour un nombre important de paramètres, la méthode devient moins intéressante que les méthodes de descente [Nouatin 00].

B. Les algorithmes génétiques

Holland [Holland 75] propose une méthode basée sur la théorie de l'évolution : les algorithmes génétiques. Ces algorithmes se basent sur des processus stochastiques appliqués à une population (ensemble de points) dont les éléments tendent vers le jeu de paramètres optimal.

A partir d'une population initiale de N individus (N jeux de paramètres différents), un algorithme génétique se décrit en trois étapes :

- *Sélection* : parmi les N individus initiaux, deux sont tirés aléatoirement
- *Croisement* : les deux individus parents donnent naissance à un individu fils, qui représente la moyenne pondérée des parents

- *Mutation* : On modifie le nouvel individu de manière aléatoire, par l'addition d'un bruit.

Ces algorithmes peuvent être améliorés en gardant une partie de la population initiale. Un des avantages de ces algorithmes est le fait qu'ils convergent vers un minimum global. De plus, les résultats obtenus ne dépendent pas de l'initialisation. En contre, partie ils nécessitent un grand nombre d'itérations, ce qui se révèle être problématique lorsque le temps de calcul de la fonction coût devient non négligeable.

1.2 Les méthodes à direction de descente

L'ensemble des méthodes à direction de descente nécessite que la fonction coût soit différentiable par rapport au jeu de paramètres Θ . Dans le cas d'une fonction coût une fois différentiable la condition d'optimalité peut s'écrire :

$$\frac{\partial f_c}{\partial \Theta} = \frac{\partial F}{\partial \Theta} (F(\Theta) - M) = 0 \quad (114)$$

où f_c représente la fonction coût, F est un opérateur inversible permettant de relier les paramètres du problème d'entrée aux observables (sortie) et M est l'ensemble des mesures expérimentales. En fait le problème direct peut être vu comme :

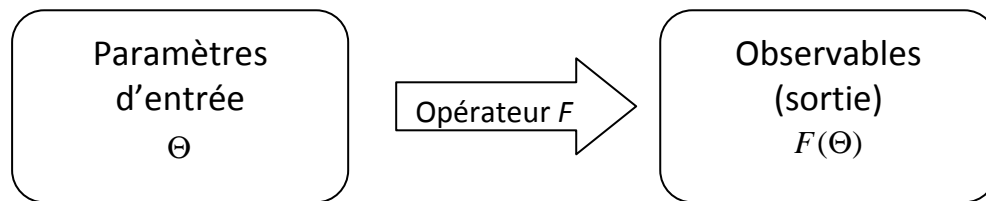


Figure 120: entrée et sortie du problème direct

Dans le cas où la fonction coût est deux fois différentiable, la condition d'optimalité peut s'écrire :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_c}{\partial \Theta} &= \frac{\partial F}{\partial \Theta} (F(\Theta) - M) = 0 \\ \frac{\partial^2 f_c}{\partial \Theta^2} &> 0 \end{aligned} \quad (115)$$

Ces méthodes, à la différence des méthodes d'ordre zéro, ont la particularité de converger rapidement. Néanmoins, elles ont le défaut de converger vers des minima locaux. Par conséquent, le résultat de l'optimisation peut dépendre fortement du jeu de paramètres utilisé pour l'initialisation.

Dans ces méthodes, on parle de direction de descente d pour la fonction f_c si celle si peut s'écrire :

$$\frac{\partial f_c}{\partial \Theta} \cdot d < 0 \quad (116)$$

où d est une direction de descente. Dans ce cas, pour un α suffisamment petit, on a $f(\Theta + \alpha d) < f(\Theta)$. On utilise donc cette notion pour minimiser la fonction coût.

1.3 Choix d'une méthode d'optimisation

Généralement, les méthodes inverses nécessitent des temps de calcul assez importants du fait du nombre de calculs nécessaires pour trouver un optimum. Même si grâce aux développements de l'informatique les temps de calcul ont pu être diminués, il en demeure que le choix de la méthode d'optimisation reste conditionné par le fait qu'il est préférable de minimiser le nombre d'estimation de la fonction coût, mais aussi par le coût temporel du modèle direct.

Dans le présent contexte, l'utilisation des méthodes d'ordre zéro a été préférée notamment du fait de la possibilité d'obtenir des minima globaux et non locaux et du fait que le calcul direct est rapide (environ 400s pour un calcul).

La méthode choisie est présentée dans le paragraphe suivant.

2. Algorithme MOOPI

2.1 Présentation de l'algorithme

Nous avons choisi d'utiliser un algorithme d'analyse inverse développé au Cemef dans le cadre de la thèse d'Emile Roux [Roux 10]. Cette algorithme est nommé MOOPI, pour *MODular software dedicated to Optimisation and Parameters Identification*. Ce dernier a été co-développé dans le cadre de cette thèse, afin de pouvoir l'appliquer à notre problématique. Dans ce paragraphe, nous présenterons les grandes lignes de l'algorithme MOOPI, sa validation ainsi que son application sur des résultats de traction Taboo.

La méthode d'optimisation repose sur un opérateur de krigeage. Cet opérateur de krigeage a pour but de proposer une approximation de la valeur de la fonction coût sur tout le domaine d'optimisation. En fait cette évaluation se base sur une première série de calculs EF servant à créer une première surface de krigeage. La description de l'opérateur de krigeage est disponible dans [Roux 10]. Une fois obtenue une première surface de krigeage, il est nécessaire de l'explorer et de l'exploiter afin de trouver un nouveau point pouvant être susceptible d'être une meilleure solution au problème d'optimisation. La résolution du problème d'optimisation se fait par l'ajout successif de nouveaux points. Le choix d'un nouveau point peut se faire selon différentes méthodes, ici nous utilisons un critère d'amélioration espérée (expected improvement, EI). Pour trouver un nouveau point à explorer, il faut minimiser ou maximiser l'EI. Mais ces fonctions EI sont souvent des fonctions multi extrema, cette optimisation fait appel à un algorithme génétique. En effet un

algorithme à direction de descente risquerait de faire converger le code vers un minimum local et non global.

Le schéma général de l'algorithme MOOPI est présenté ci-dessous :

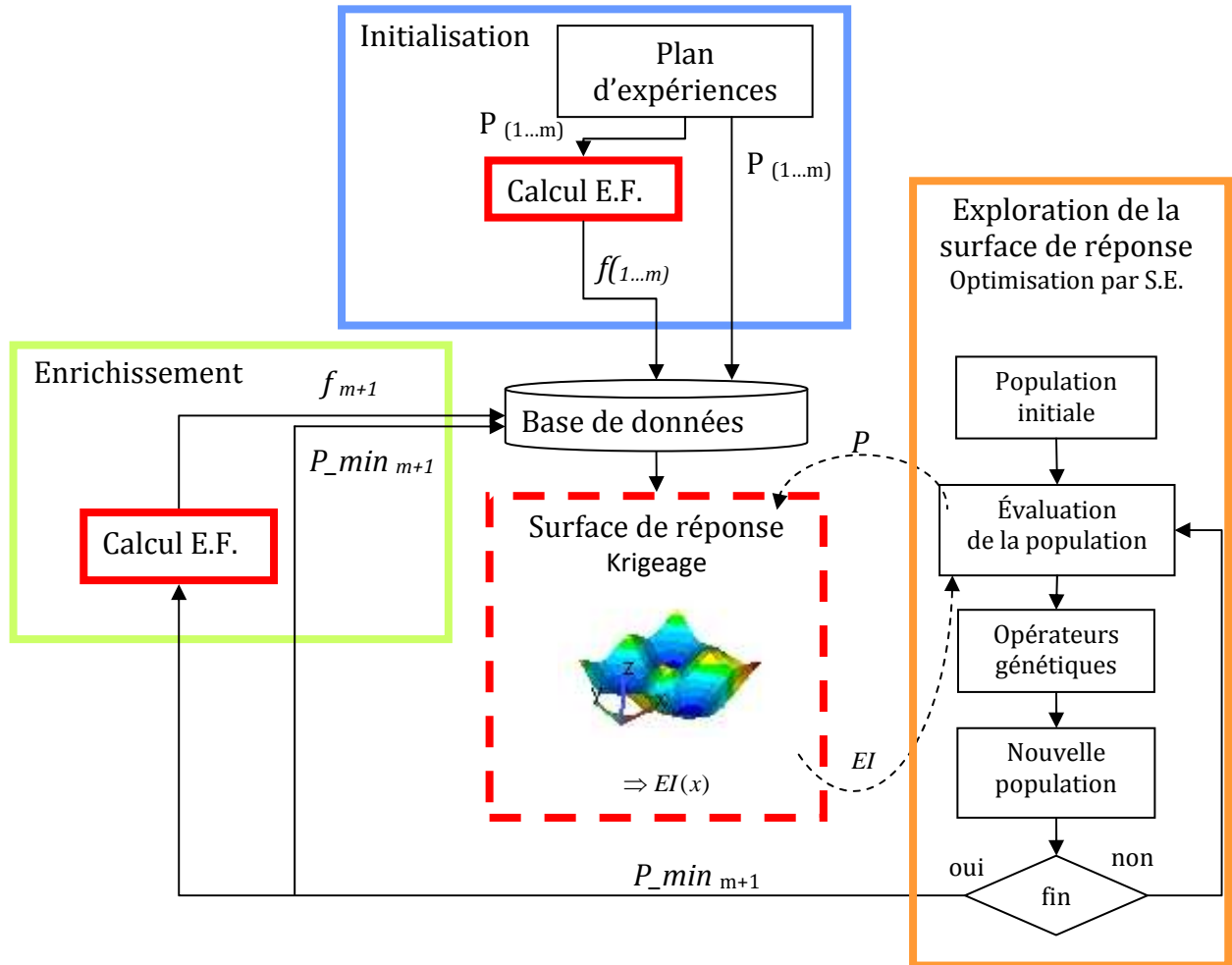


Figure 121: Schéma de l'algorithme d'optimisation Global (EGO) [Roux 10]

2.2 Choix d'une fonction coût : mesures globales

L'écart entre une courbe calculée numériquement (décrites par N points U_{ni}) et une courbe de référence mesurée in situ (par N points U_{ei}) est évaluée par une fonction scalaire de type moindres carrés. Cette fonction erreur (fonction coût ou fonction objectif) est définie de la manière suivante :

$$fc = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{(U_{ei} - U_{ni})^2}{\Delta U_i^2} \quad (117)$$

Elle est pondérée par un paramètre ΔU_i caractérisant l'erreur expérimentale (ou numérique) du point de mesure indicé i . Nous avons fait le choix de caler notre fréquence

d'échantillonnage sur la fréquence du calcul numérique souvent moins échantillonnée que l'expérience.

Prenons l'exemple d'une courbe force-déplacement : la fonction coût peut s'écrire comme suit :

$$f_c = \frac{\sum_{i=1}^n (F_{\text{exp}}^i(x_i) - F_{\text{num}}^i(x_i))^2 * \Delta x_i}{\sum_{i=1}^n (F_{\text{exp}}^i(x_i))^2 * \Delta x_i} \quad (118)$$

Cette formulation avec une somme discrète au numérateur et au dénominateur permet de normaliser le calcul de l'écart par une « moyenne » des F_{exp} , cette formulation évite les divisions par 0.

De plus, on peut remarquer dans les expressions précédentes le terme Δx_i ; celui-ci permet de s'affranchir des problèmes de sur-échantillonnages de certaines zones. En effet, cette formulation se base sur l'ajout d'un terme proportionnel à la valeur sur l'axe des abscisses.

2.3 Choix de la loi de comportement :

En fonction des résultats d'essai, une loi de comportement est choisie pour décrire le plus finement possible le comportement à chaud de l'acier.

La loi de comportement utilisée est une loi élastoviscoplastique de type multiplicatif, représenté par les équations 46 et 47 du chapitre 3. Nous avons fait le choix d'une expression sans seuil, en effet on peut estimer qu'à haute température la contrainte seuil est nulle. De plus la termodépendance de la consistance viscoplastique est exprimée avec un terme d'activation thermique exponentiel. Pour cette loi en monodimensionnel, la contrainte s'écrit comme suit :

$$\sigma = A e^{-\beta T} \epsilon^n \dot{\epsilon}^m \quad (119)$$

2.4 Validation de l'algorithme :

Pour valider l'algorithme, nous avons simulé une identification de paramètres de la façon suivante :

- Dans un premier temps, nous avons effectué une simulation directe de l'essai avec un certain jeu de paramètres pour une température au centre de 900°C. De plus, durant cette simulation, un gradient thermique tel qu'il a pu être simulé avec le code 2D a été appliqué.

- Dans un second temps, à partir d'une valeur différente du jeu de paramètres nous avons appliqué l'algorithme d'identification. Le but étant de trouver des valeurs de paramètres proches de celles utilisées dans la simulation de référence.

A. Simulation de référence :

La simulation de référence a été réalisée à l'aide d'une loi élasto-viscoplastique multiplicative dont la forme est la suivante :

$$\sigma = K \varepsilon^n \dot{\varepsilon}^m \quad (120)$$

Le jeu de paramètres à identifier est (K, m, n et E). La simulation de référence a été effectuée avec les valeurs de paramètres suivantes:

$$K = 1462 \text{ MPa}, m = 0.221, n = 0.234 \text{ et } E = 50835 \text{ MPa}$$

B. résultats

A partir d'une plage de paramètres assez étendue (tableau 1) nous avons essayé de retrouver le jeu de paramètre initial en utilisant l'algorithme MOOPI.

	K (MPa)	n	m	E (MPa)
min	100	0,005	0,005	50000
max	2000	0,45	0,45	200000

Tableau 1 : gamme des paramètres utilisés comme base pour l'identification.

Lors du premier krigeage, une grille de 32 points est créée. Cette grille prenant les extrema de chacune des valeurs permet l'initialisation de la procédure d'identification.

Avec cette méthode, comme le montre la Figure 122, nous remarquons qu'il est nécessaire de recourir à de nombreux calculs éléments finis : le taux de convergence est relativement lent. En effet sur cette figure chaque point correspond à une valeur de fonction coût calculée par le modèle direct. Donc chacun des points correspond à un appel au solveur numérique. La courbe pleine quant-à elle correspondant à la meilleure évaluation.

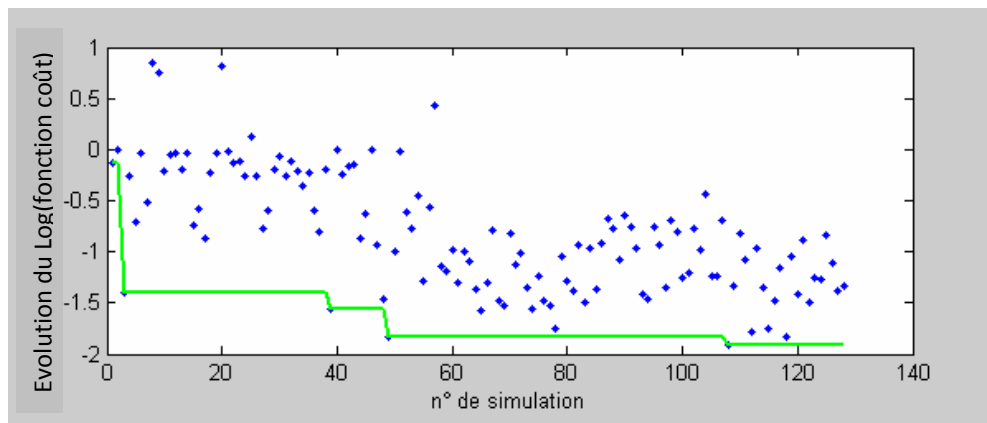


Figure 122: Evolution de la valeur de la fonction coût en fonction du nombres de simulations

Mais après l'ensemble de ces calculs (c'est-à-dire 125 appels au solveur numérique), l'optimisation converge vers le jeu de paramètres suivants ($K= 1410 \text{ MPa.s}^{-m}$ $m = 0,207$ $n= 0,224$ $E= 50000 \text{ MPa}$). Donc comme le montre la Figure 123, les résultats sont très proches l'un de l'autre puisque l'erreur entre les deux simulations est de 1.2%.

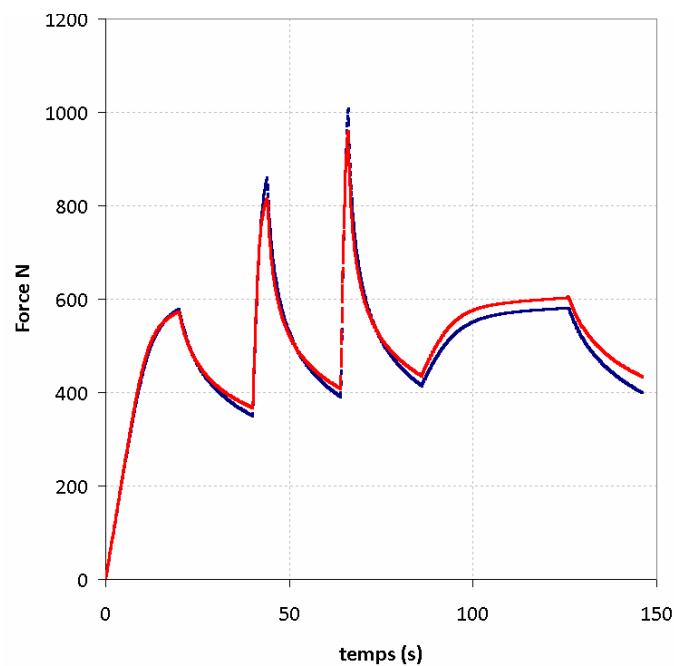


Figure 123: Comparaison entre courbe numérique référence (rouge) et la courbe optimisée (bleu)

C. Intérêt et nécessité d'une mesure locale pour l'optimisation :

Nous allons étudier dans ce paragraphe la nécessité d'avoir d'autres observables que la simple mesure de force. A travers un exemple, nous verrons que même avec un gradient

thermique bien modélisé et en appliquant une sollicitation à une éprouvette, on peut trouver plusieurs jeux de paramètres donnant quasiment la même erreur en force par rapport à une solution expérimentale.

Nous considérons comme référence un essai complexe à 900°C sur la nuance DP780. Cet essai a été simulé et grâce à l'algorithme d'analyse inverse présenté ci-dessus, nous avons cherché à minimiser la fonction coût. Ainsi nous avons pu déterminer deux jeux de paramètres optimaux donnant deux fonctions coût proches l'une de l'autre. On remarque ainsi qu'avec la loi de comportement considérée, pour un même problème, plusieurs jeux de paramètres peuvent être solution (Figure 124). Donc se pose la question de savoir discriminer le meilleur des deux jeux de paramètres.

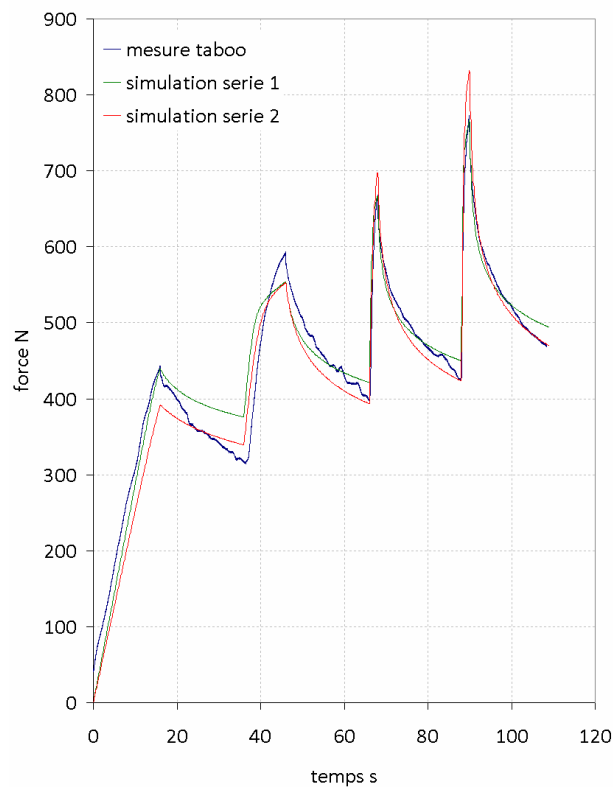


Figure 124: comparaison entre résultats expérimentaux et courbes optimisées

Pour cela on peut s'appuyer sur une mesure locale, c'est-à-dire connaître à tout instant de l'essai de traction le déplacement en différents points de l'éprouvette ; il s'agit typiquement de l'allongement mesuré par un extensomètre. Ici nous ne considérerons pas une mesure ponctuelle de type extensomètre mécanique mais plutôt une mesure de type extensomètre speckles. Donc nous allons mesurer le déplacement entre deux zones de mesure, comme cela a été décrit (Chapitre 5) et comparer la mesure de l'allongement avec les allongements trouvés numériquement pour les deux jeux de paramètres Figure 125. Sur cet essai ,10 images par seconde ont été analysées.

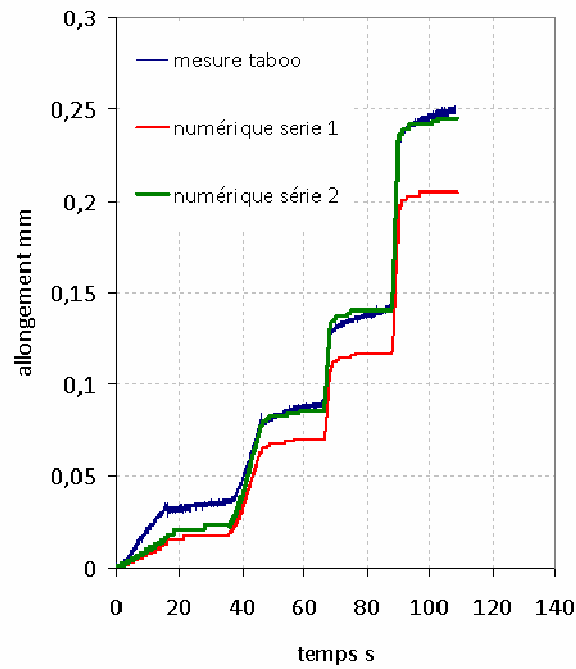


Figure 125: comparaison entre les courbes de déplacement issues de l'optimisation et la courbe expérimentale

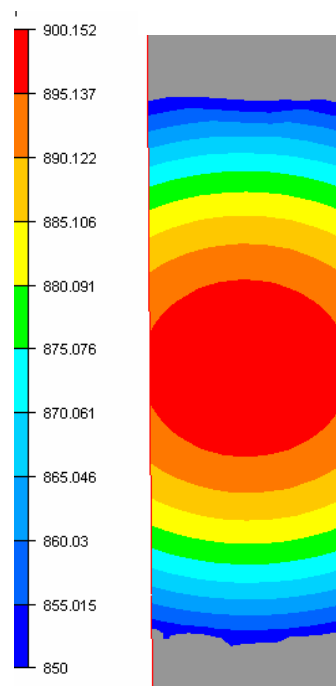


Figure 126: simulation du gradient thermique (en °C) dans la zone centrale de l'éprouvette

Sur les deux courbes numériques, on peut noter une différence notable sur la première partie de la courbe, celle-ci provient probablement d'un mauvais respect de la consigne lors de l'essai Taboo.

De plus au vu du gradient thermique qui est rappelé par la Figure 127, on peut concevoir qu'un même jeu de paramètre puisse donner une réponse satisfaisante en force sans pour autant concentrer les déformations de la même façon, et donc l'allongement de la zone centrale peut différer d'un jeu de paramètre à l'autre. Dans le cas présent, on note que seul un des deux jeux de paramètres offre un résultat satisfaisant en terme de déplacement. Il est donc nécessaire d'avoir une mesure locale lors de nos essais. Mais la fonction coût doit elle aussi inclure cet allongement pour pouvoir optimiser les paramètres de la loi de comportement sur cette mesure.

D. Vers une nouvelle fonction coût :

Plusieurs modèles de la mesure peuvent servir à former la fonction permettant l'analyse de l'écart simulation/expérience. Une forme générale de la fonction coût peut être définie en se basant sur un calcul de l'écart entre l'expérience et la simulation de la force (équation 118). Comme nous venons de le voir, cette mesure peut ne pas s'avérer suffisante et nécessiter l'ajout de la prise en compte des erreurs mesure/simulation associées à différents points de mesure. Cela passe par la construction d'une nouvelle fonction coût. Cette nouvelle fonction inclut l'allongement mesuré dans la zone centrale.

$$f_{c_U} = \frac{\sum_{i=1}^n (\Delta l^i_{\text{exp}}(x_i) - \Delta l^i_{\text{num}}(x_i))^2 * \Delta x_i}{\sum_{i=1}^n (\Delta l^i_{\text{exp}}(x_i))^2 * \Delta x_i} \quad (121)$$

où Δl représente la différence de déplacement entre le capteur (déplacement du spot laser) situé près du mors fixe et le capteur situé près du mors mobile. Les indices *exp* et *num* signifient respectivement expérimental et numérique. Ainsi une fonction coût globale peut être définie par l'expression suivante :

$$f_{c_{\text{tot}}} = \omega \frac{\sum_{i=1}^n (F^i_{\text{exp}}(x_i) - F^i_{\text{num}}(x_i))^2 * \Delta x_i}{\underbrace{\sum_{i=1}^n (F^i_{\text{exp}}(x_i))^2 * \Delta x_i}_{f_{c_F}}} + 1 - \omega \frac{\sum_{i=1}^n (\Delta l^i_{\text{exp}}(x_i) - \Delta l^i_{\text{num}}(x_i))^2 * \Delta x_i}{\underbrace{\sum_{i=1}^n (\Delta l^i_{\text{exp}}(x_i))^2 * \Delta x_i}_{f_{c_U}}} \quad (122)$$

On note dans cette expression l'ajout d'un paramètre de pondération de chacune des composantes (force ou déplacement). Dans la suite de ce travail, nous donnerons un poids plus important à la mesure du déplacement qu'à la mesure de force. En effet, on souhaite ainsi « bloquer » notre système pour lui imposer des paramètres rhéologiques permettant de reproduire le mieux possible l'allongement de la zone utile des éprouvettes.

3. Identification de paramètres rhéologiques sur des essais Taboo

Nous souhaitons caractériser le comportement mécanique de nos nuances dans des conditions thermo-mécaniques proches de celles rencontrées lors de la solidification. En effet s'il existe des données relativement conséquentes pour les aciers dans le domaine des basses températures et des grandes déformations, les données hautes températures pour des faibles déformations sont plus rares. Ainsi le matériau a été caractérisé entre 900°C et des températures supérieures à la température de solidus (jusqu'à 30% de phase liquide) et pour des vitesses de déformation faibles.

3.1 Essais de traction à chaud

L'essai de traction uniaxiale est un essai simple à mettre en œuvre et de ce fait, il est couramment utilisé. Les géométries d'éprouvette utilisées dans ce genre d'essai ont plusieurs formes, plates, entaillées, cylindriques.... Mais elles doivent être suffisamment élancées pour avoir un champ de contrainte homogène dans leur partie dite « utile ». Plusieurs types d'essais de traction peuvent être envisagés.

A. Traction simple

Certains essais de traction ont été pilotés avec une phase de relaxation. La relaxation permet de mettre en évidence la diminution de contrainte résultant du maintien de l'éprouvette à une déformation donnée. Le temps de maintien doit être suffisamment long pour observer cette relaxation (dont le temps caractéristique est de l'ordre de η/E)

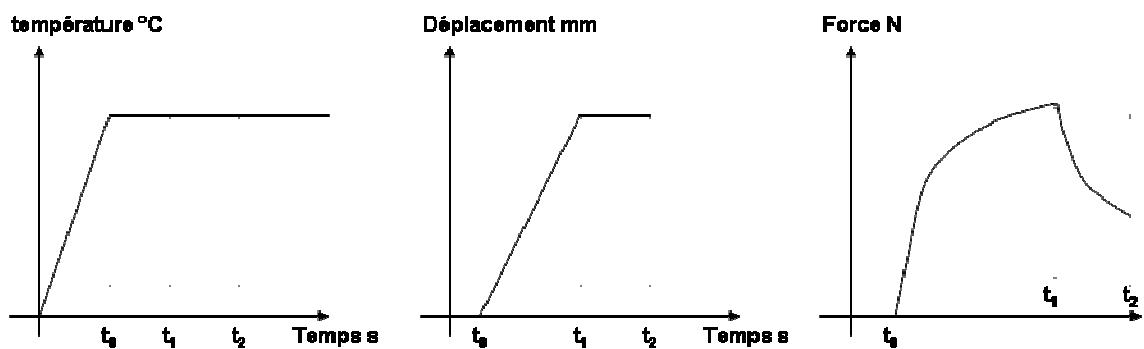


Figure 127: procédure expérimentale pour des essais dits simples

L'identification des paramètres d'un modèle élasto-viscoplastique sur des essais de traction isotherme décrits précédemment peut donner lieu à plusieurs jeux de coefficients pour un même essai. C'est pourquoi nous avons réalisé des essais complexes décrits ci-dessous.

De plus, pour le reste des essais, afin d'en limiter le nombre, on a cherché à balayer un certain domaine de vitesse de déformation en un seul essai et à mettre en évidence les

3. Identification de paramètres rhéologiques sur des essais Taboo

effets de la viscosité du matériau. Nous avons donc fait varier la vitesse de déformation au cours de l'essai via une variation de la vitesse de traverse.

B. Traction complexe- relaxation

Quelle que soit la température d'essai, les niveaux visés de déformation et les vitesses de déformation utilisées sont les mêmes. L'essai se décompose alors en quatre périodes de charge entrecoupées de périodes de relaxation de 20s. La relaxation permet de mettre en évidence la diminution de la contrainte résultant du maintien d'un élément de volume unidimensionnel à déformation constante. Cette relaxation est utile pour l'identification car elle permet de prendre en compte de plus faibles vitesses de déformation et ainsi de mettre en évidence les effets de viscosité. Après un tel cycle de relaxation, lors d'une nouvelle mise en charge, les effets de l'écrouissage engendrés par la première mise en charge peuvent partiellement ou complètement disparaître.

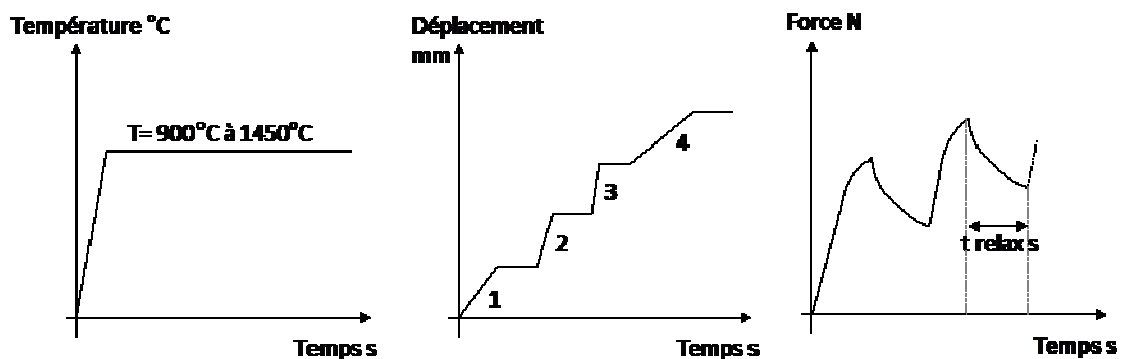


Figure 128: procédure expérimentale pour des essais dits complexes

Comme nous avons pu l'évoquer précédemment, les données de la littérature sont particulièrement pauvres pour des essais à petites déformations. Dans le cas des procédés de solidification, ce sont justement ces valeurs qui nous intéressent. Dans le cas présent, nous avons choisi d'atteindre 6% de déformation ; le choix d'atteindre cette valeur de déformation a été dicté par les observations faites sur des cartes de déformations obtenues par simulation numérique de procédé de fonderie ; en effet, localement de tel taux de déformation peuvent être atteints.

Nous avons estimé les valeurs de déplacement appliquées sur les mors pour atteindre ces 6%. En effet comme nous avons pu le noter dans le chapitre 4, lors d'un essai de traction un peu plus de 2/3 du déplacement appliqué sur l'éprouvette est concentré dans la zone utile. Par conséquent pour obtenir une déformation de 6% sur une zone utile mesurant 10mm, nous avons appliqué au niveau des mors un déplacement de 0,8mm.

Enfin, pour chaque température étudiée, l'essai est systématiquement répété afin de s'assurer de la reproductibilité des essais.

Pour la régulation en température durant les essais, des thermocouples K ont été utilisés, mais ce jusque 1200°C. Les essais qui ont été réalisés à des températures plus élevées ont été régulés en utilisant des thermocouples S. Ce passage d'un type de

thermocouple à l'autre est nécessaire car les thermocouples K se détériorent très rapidement au dessus de 1200°C du fait de la croissance des grains d'alliage qui les composent. Ce changement de taille de grain produit des erreurs dans la mesure.

3.2 Résultats :

Avant de présenter dans le détail les résultats de l'analyse inverse, nous pouvons faire quelques remarques sur les essais.

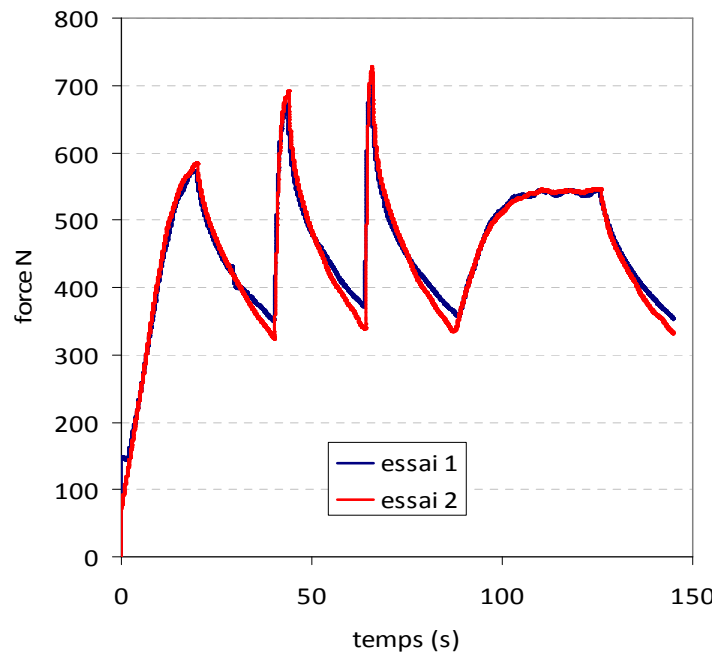


Figure 129 : comparaison des résultats issus des essais de traction de l'acier ST52 à 950°C

Nous remarquons tout d'abord, comme le montre la Figure 129 que la reproductibilité des résultats est très satisfaisante. C'est le cas pour l'ensemble des températures testées, ce qui souligne la précision de la chaîne de mesures.

De plus on peut noter que la viscosité apparaissant à haute température est accompagnée d'un certain nombre de phénomènes. Ces phénomènes sont directement liés à la température et au temps. On peut alors comme l'avait fait [Francois 93], et [Saint-Germain06] distinguer plusieurs phénomènes sur des essais de traction complexes.

Introduisons le terme $\frac{\alpha}{\mu}r$ où α est une constante, μ le module de cisaillement et r la vitesse de restauration. On peut distinguer trois cas différents :

- Le cas courant $\frac{\alpha}{\mu}r > 0$, où les phénomènes d'écrouissage (c'est-à-dire l'augmentation des densités de dislocation) sont prépondérants et par conséquent la contrainte d'écoulement augmente avec la déformation.

3. Identification de paramètres rhéologiques sur des essais Taboo

- On peut observer un cas de régime quasi stationnaire pour $\frac{\alpha}{\mu} r = 0$, ce régime est atteint lorsqu'un équilibre peut être trouvé entre deux phénomènes concurrents, l'écroûissage et la restauration.
- Et enfin, lorsque la restauration prend le pas sur l'écroûissage $\frac{\alpha}{\mu} r < 0$.

Ces trois phénomènes peuvent être observés sur la figure 131, il s'agit d'un essai de traction complexe à 1250°C sur la nuance ST52.

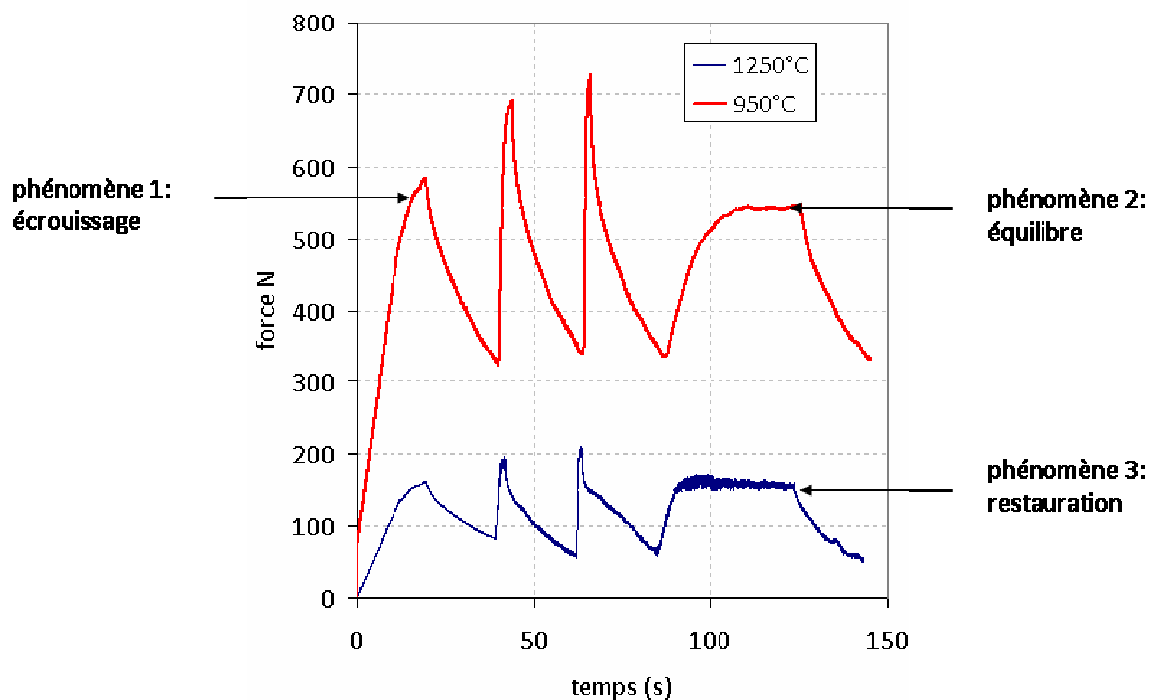


Figure 130: mise en évidence de la compétition entre les phénomènes d'écroûissage et de restauration pour deux essais de traction sur du ST52 à différentes températures.

Pour la suite de l'étude nous ne considérerons pas le phénomène de restauration dans la modélisation numérique de l'essai. D'une part afin de limiter le nombre de paramètres à identifier et d'autre part comme nous le verrons, déjà dans une forme simplifiée, la loi de comportement utilisé offre des résultats satisfaisants.

A. Stratégie d'optimisation :

Pour les simulations numériques, nous utilisons le modèle EF présenté précédemment dans le chapitre 3. Nous rappelons ici que nous avons choisi d'utiliser d'une part un modèle 2D plan pour les problèmes électrique et thermique (en le modifiant pour prendre en compte les flux thermiques à travers les grandes faces) et d'autre part un modèle 3D complet pour la résolution mécanique.

Plus précisément, le modèle 2D plan électrique thermique est utilisé pour modéliser la phase de chauffage. Le champ thermique est projeté sur la géométrie 3D. Pendant l'essai

mécanique, nous considérons que la distribution de température ne varie pas. De ce fait, nous appliquons des conditions aux limites adiabatiques durant la simulation. La simulation numérique 3D reproduit quant à elle l'ensemble des chemins de sollicitation (phase de traction et phase de relaxation). Les simulations numériques correspondant aux essais sont elles aussi pilotées en vitesse de traverse. En effet, on applique sur les bords de l'éprouvette numérique les mêmes conditions mécaniques que celles appliquées sur la machine Taboo.

Expérimentalement, la force mesurée par le capteur est enregistrée en continu. Durant l'essai, les speckles sont aussi utilisés. Du champ de déplacement ainsi trouvé on extrait une mesure de l'allongement (on parle ici de la technique d'extensomètre laser décrite précédemment). Numériquement des capteurs ont été placés aux mêmes positions ; ces capteurs permettent une comparaison des déplacements trouvés numériquement et expérimentalement.

Du fait de l'utilisation de deux observables (la force et l'allongement) la fonction coût doit être adaptée. De plus comme nous l'avons montré précédemment la seule mesure globale de la force ne permet pas une optimisation convenable. Donc une stratégie d'optimisation basée sur une fonction coût couplant force et allongement qui peut s'écrire comme suit semble plus adéquate :

$$fc_{tot} = \omega \frac{\sum_{i=1}^n (F^i_{exp}(x_i) - F^i_{num}(x_i))^2 * \Delta x_i}{\sum_{i=1}^n (F^i_{exp}(x_i))^2 * \Delta x_i} + (1 - \omega) \frac{\sum_{i=1}^n (\Delta l^i_{exp}(x_i) - \Delta l^i_{num}(x_i))^2 * \Delta x_i}{\sum_{i=1}^n (\Delta l^i_{exp}(x_i))^2 * \Delta x_i} \quad (123)$$

La figure 132 permet de comparer les déplacements de différents points du maillage numérique avec ceux mesurés par speckles sur une éprouvette de ST52. Comme nous pouvons le remarquer le fait de forcer l'optimisation sur l'allongement plutôt que sur la force nous permet d'avoir des résultats numériques et expérimentaux qui coïncident particulièrement bien.

3. Identification de paramètres rhéologiques sur des essais Taboo

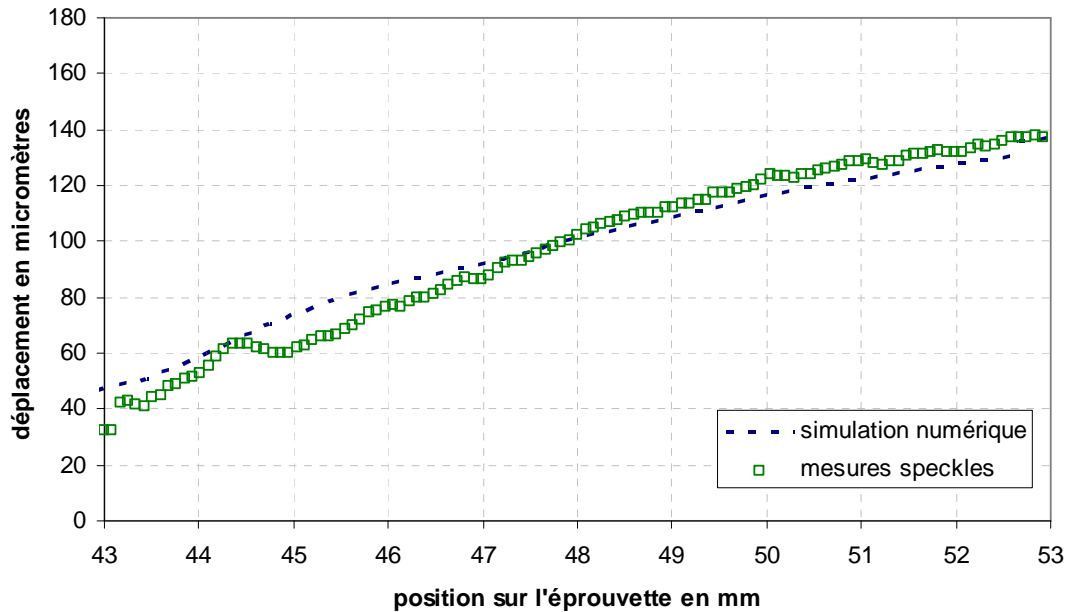


Figure 131: comparaison de l'allongement dans la zone centrale entre une mesure speckles et la simulation numérique

Nous l'avons déjà présenté précédemment, et la Figure 132 le confirme, les algorithmes génétiques nécessitent un grand nombre d'itérations avant de converger vers une solution. En fait le grand nombre d'itérations n'est pas à proprement parler dû à une convergence lente, mais plutôt au fait que l'algorithme explore continuellement des zones situées loin du minimum local détecté et ce dans l'espoir de trouver un nouveau minimum local.

Pour le cas présent, la Figure 132 montre un calcul qui a convergé vers une fonction coût raisonnable (erreur d'environ 5%) après 199 appels au solveur direct. On peut noter que ces 199 calculs sont lancés en séquentiel et que sur un DuoCore (2 Cpu) 2.66 GHz le calcul direct dure environ 7min. Sur cette même Figure 132 (haut), on note que l'algorithme a exploré des jeux de paramètres très différents d'un calcul à l'autre. En effet sur cette figure chaque point de la figure du bas, comme précédemment, montre les différents appels au solveur numérique. Quant-à la figure du haut, nous pouvons y voir les différents jeux de paramètres utilisés.

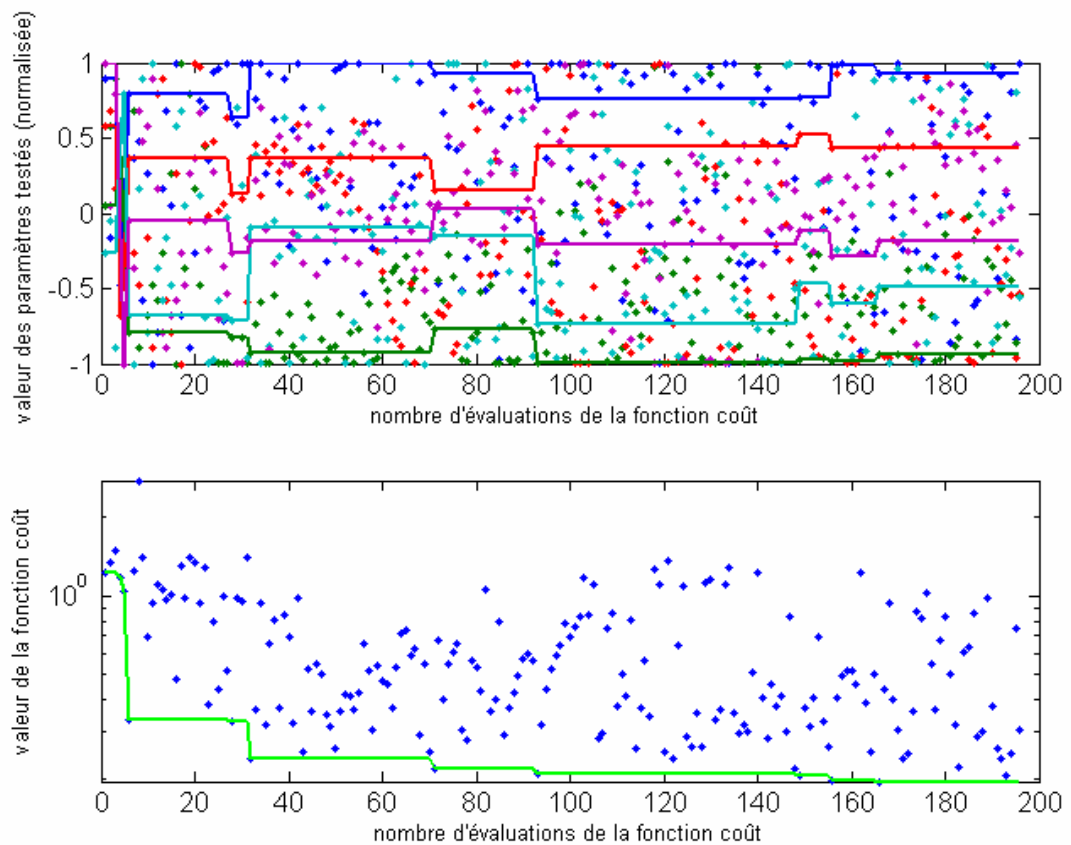


Figure 132: En bas, évolution de la fonction coût en fonction du nombre d'appels au solveur. En haut nuage de points montrant l'ensemble des paramètres testés. Pour pouvoir être représentés sur un même graphe ces paramètres ont tous été normalisés entre -1 et 1.

B. Résultats DP780 :

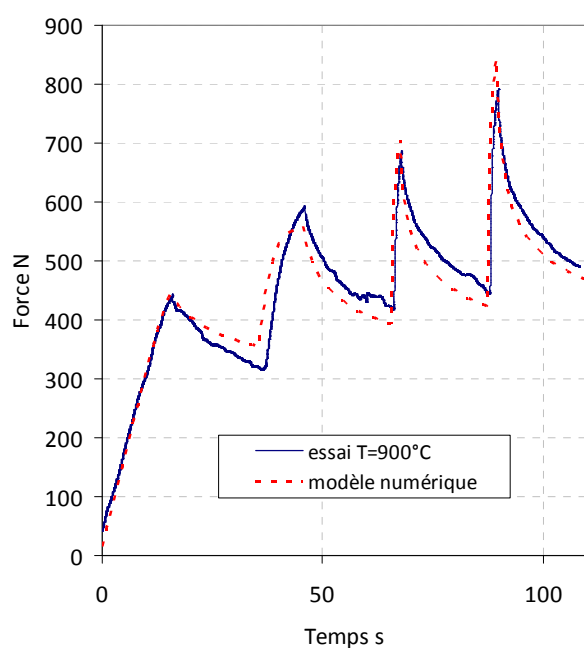
Nous présentons ici des résultats pour le DP 780 entre 900°C et 1350°C. Concernant la caractérisation de cette nuance d'acier, nous avons réalisé la séquence traction-relaxation présentée dans le Tableau 2, pour quatre températures : 900°C, 1000°C, 1200°C et 1350°C

3. Identification de paramètres rhéologiques sur des essais Taboo

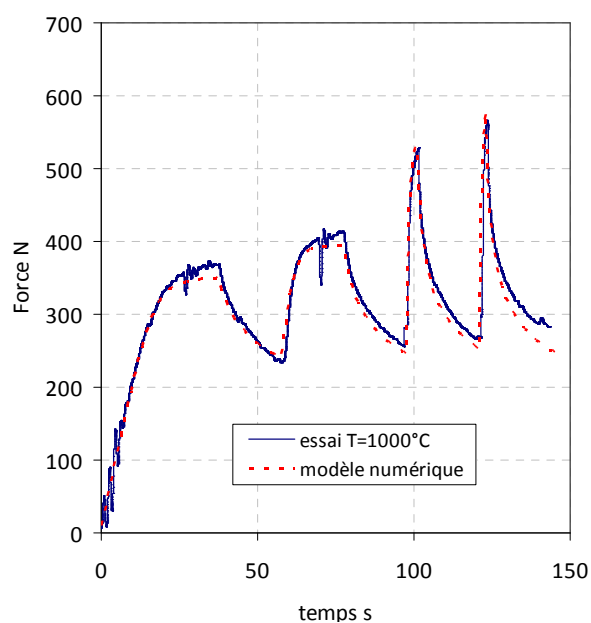
	temps final (s)	Vitesse (mm.s ⁻¹)	Déplacement cumulé (mm)	Déformation nominale (2/3 du déplacement imposé)
Charge 1	40	0.005	0.2	0.016
Relaxation 1	60	0	0.2	0.016
Charge 2	80	0.01	0.4	0.032
Relaxation 2	100	0	0.4	0.032
Charge 3	104	0.05	0.6	0.048
Relaxation 3	124	0	0.6	0.048
Charge 4	126	0.1	0.8	0.064
Relaxation 4	146	0	0.8	0.064

Tableau 2 : description du cycle chargement et relaxation appliqué sur l'éprouvette.

La Figure 133 illustre la comparaison entre le modèle numérique (pointillés) et l'expérience (traits plein) sur l'évolution temporelle de la force au cours du temps.



900°C



1000°C

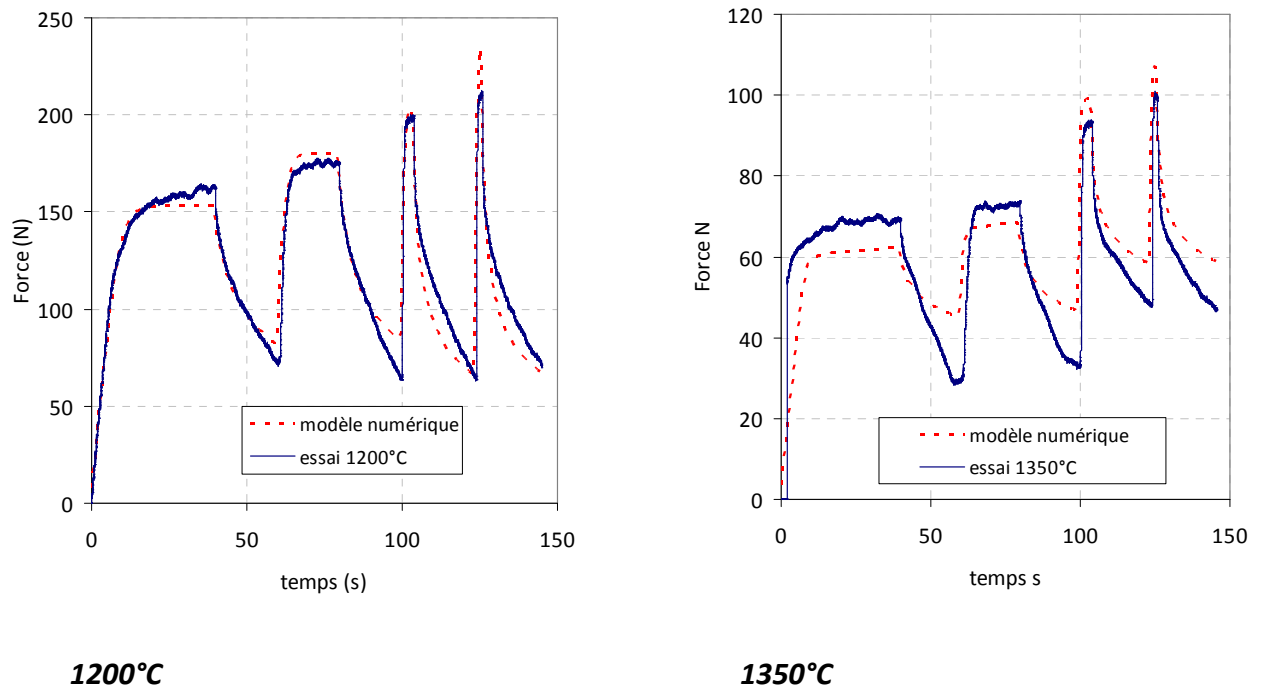


Figure 133: comparaison modèle-expérience pour les différentes températures lors des essais sur le DP780.

Nous notons que globalement le modèle permet de décrire correctement les données expérimentales. On remarque néanmoins un écart entre l'expérience et la simulation lors des périodes de relaxation surtout pour les températures les plus élevées. Ceci peut provenir d'un phénomène de restauration statique mal pris en compte dans le modèle numérique. Pour le DP780, les coefficients du modèle (équation 119) obtenus dans l'intervalle [900°C-1350°C], sont précisés ci-dessous.

$A (MPa.s^m)$	Beta (K^{-1})	m	n
737.7	0.00159	$2.36 \times 10^{-4} T - 0.1643$	0.0642

Tableau 3 : paramètres de la loi de comportement (équation 119) identifiés pour le DP780. Données valables pour la phase austénitique [900°C-1350°C]

Les valeurs du module d'Young identifiées sont présentées ci-dessous. Ces valeurs peuvent facilement être comparées avec des valeurs issues de la littérature. Une comparaison est faite en Figure 135. On constate que les ordres de grandeur sont bien respectés.

3. Identification de paramètres rhéologiques sur des essais Taboo

900°C	1000°C	1200°C	1350°C
25330	16509	12883	8234

Tableau 4 : variation du module d'Young(DP780) en fonction de la température (MPa)

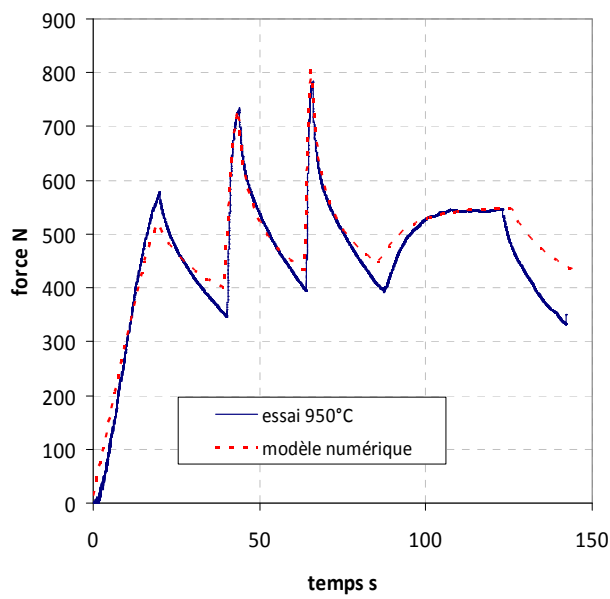
C. Résultats ST52 :

Nous présentons ici des résultats pour le ST52 entre 950°C et 1350°C.

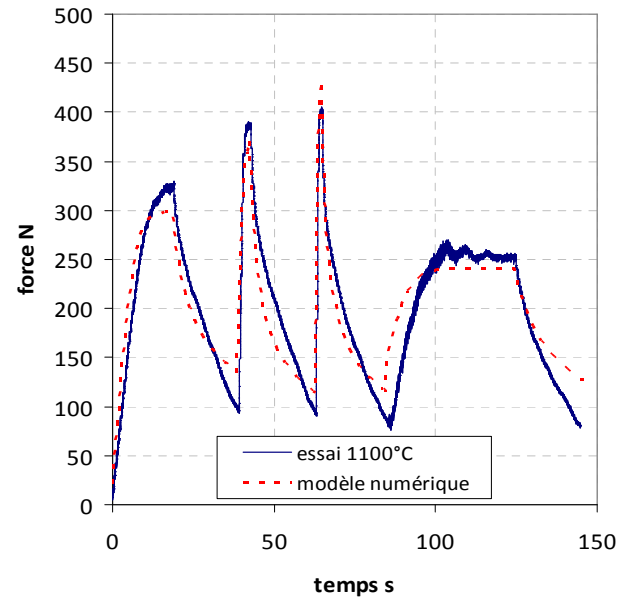
La figure illustre la comparaison modèle/expérience sur l'évolution temporelle de la force au cours du temps. Il est à noter sur cette série d'essais un changement dans l'enchaînement des paliers en vitesse de traverse. Nous avons procédé à ces changements et nous avons réalisé les essais tels qu'ils sont présentés ci-dessous. Concernant la caractérisation de cette nuance d'acier, nous avons réalisé la séquence traction relaxation présentée dans le Tableau 5 pour quatre températures 950°C, 1100°C, 1250°C et 1350°C.

	temps en fin de chaque étape (s)	Vitesse (mm.s ⁻¹)	Déplacement cumuli (mm)	Déformation nominale (2/3 du déplacement imposé)
Charge 1	20	0.01	0.2	0.016
Relaxation 1	40	0	0.2	0.016
Charge 2	44	0.05	0.4	0.032
Relaxation 2	64	0	0.4	0.032
Charge 3	66	0.1	0.6	0.048
Relaxation 3	86	0	0.6	0.048
Charge 4	126	0.005	0.8	0.064
Relaxation 4	146	0	0.8	0.064

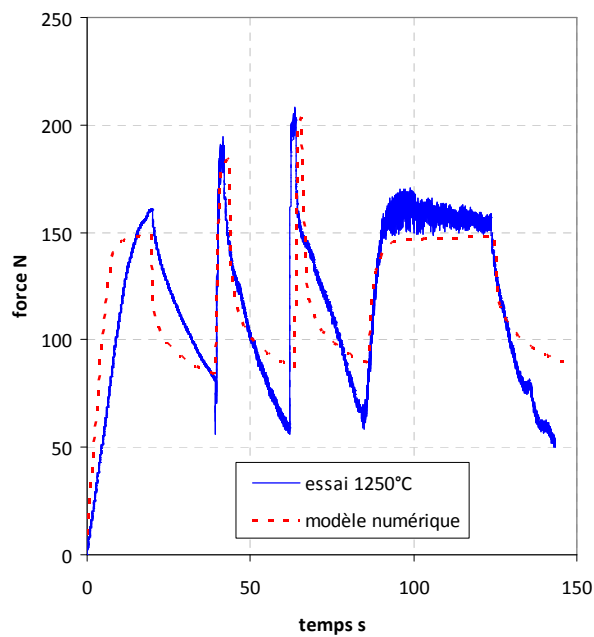
Tableau 5 : description du cycle chargement et relaxation appliqué sur l'éprouvette.



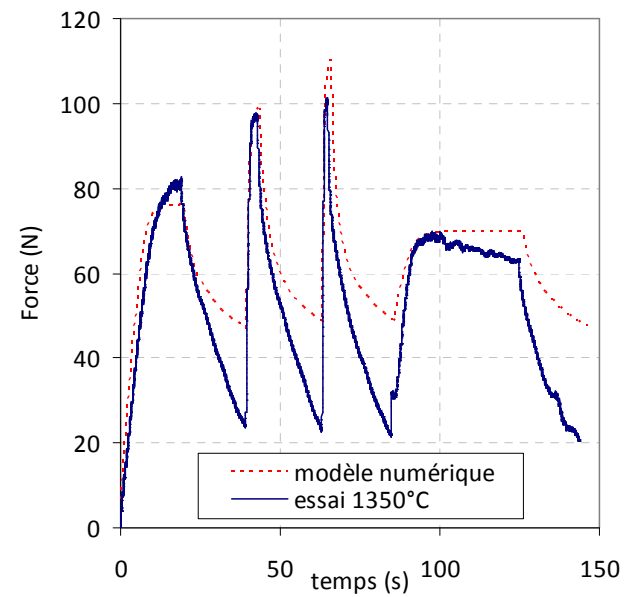
950°C



1100°C



1250°C



1350°C

Figure 134: comparaison modèle-expérience pour les différentes températures lors des essais sur le ST52.

3. Identification de paramètres rhéologiques sur des essais Taboo

$A \text{ (MPa.s}^{-m}\text{)}$	Beta (K)	m	n
1021,725	0.00061381	0.1729	0.1148

Tableau 6 : paramètres de la loi de comportement identifiés pour le ST52. Données valables pour la phase austénitique [900°C-1350°C]

Les valeurs du module d'Young identifiées sont présentées ci-dessous. Ces valeurs peuvent elles aussi être facilement comparées avec des valeurs issues de la littérature. Une comparaison est faite en Figure 135.

900°C	1100°C	1250°C	1350°C
17358	13447	10259	7862

Tableau 7 : variation du module d'Young en fonction de la température (MPa).

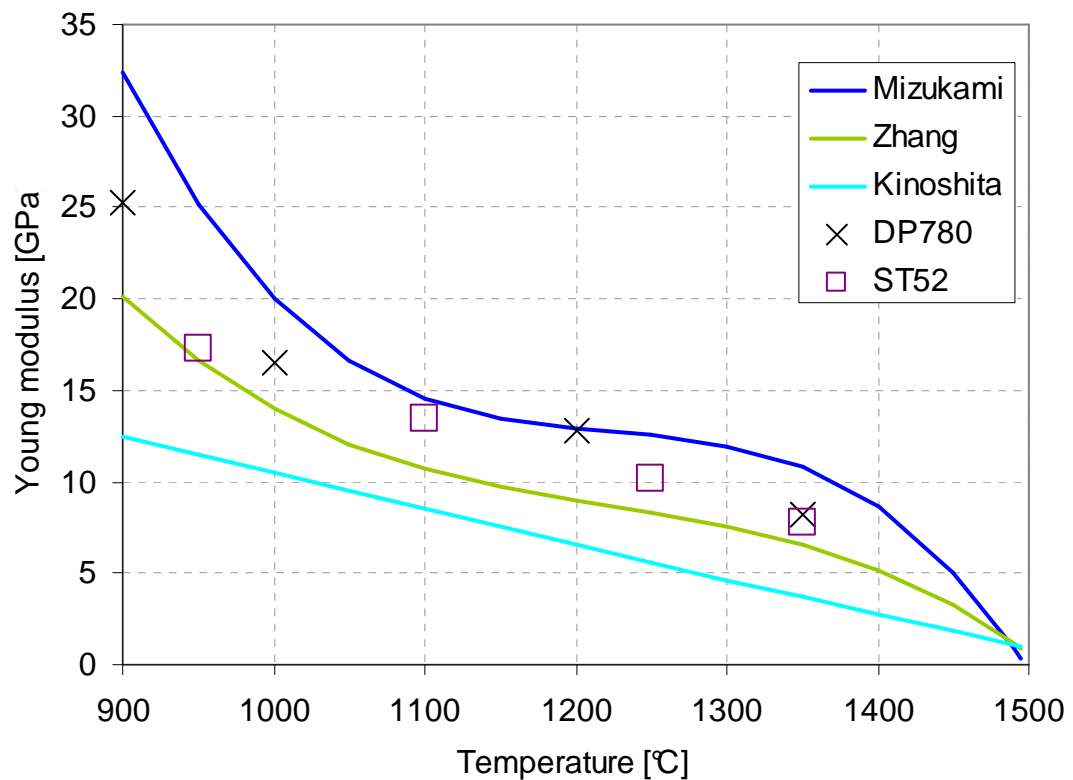


Figure 135: comparaison entre mesures de module d'Young expérimentales et issues de la littérature ([Mizukami77], [Kinoshita79] et [Zhang10])

3.3 Essai de traction à déplacement imposé

Lors des essais décrits précédemment, pour une régulation en vitesse de traverse il est impossible d'atteindre des vitesses inférieures à $5 \times 10^{-3} \text{ mm.s}^{-1}$ ce qui correspond à une vitesse de déformation nominale de $5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$. Les vitesses de déformation rencontrées en solidification pouvant être plus faibles, nous avons sur des essais de traction simple effectué un pilotage en déplacement de traverse et non plus en vitesse de traverse. Dans ce type d'essai comme le montre la Figure 136 l'échantillon subit une succession de petits paliers de déplacement. Cette méthode permet d'atteindre des vitesses bien plus faibles.

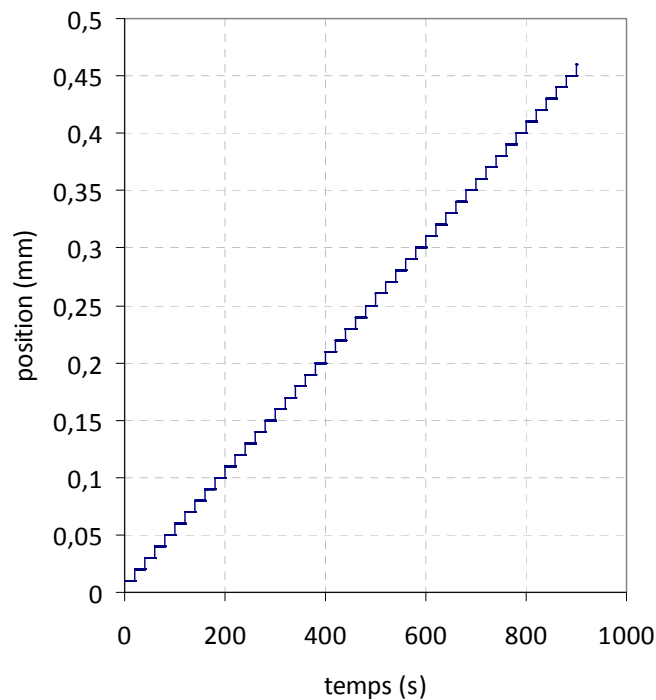


Figure 136: consigne en déplacement imposée sur l'éprouvette. Cette consigne en palier nous permet d'atteindre des vitesses plus faibles, ici $5 \times 10^{-4} \text{ mm/s}$

Ici nous présentons des résultats obtenus sur le ST52 pour deux températures différentes, 1000°C et 1250°C. Autant comme le montre la Figure 138, pour 1000°C, le signal de réponse du capteur de force est tout à fait correct, autant pour 1250°C, comme le montre la Figure 137, le signal s'avère être très bruité. Néanmoins on peut noter que le phénomène de restauration semble prendre le dessus sur l'écrouissage, comme cela avait déjà été observé sur des courbes à 1250°C mais pour une vitesse plus élevée. Sur des temps longs, comme c'est le cas ici (essai de 1000 secondes), on peut aussi observer un effet de grossissement du grain.

3. Identification de paramètres rhéologiques sur des essais Taboo

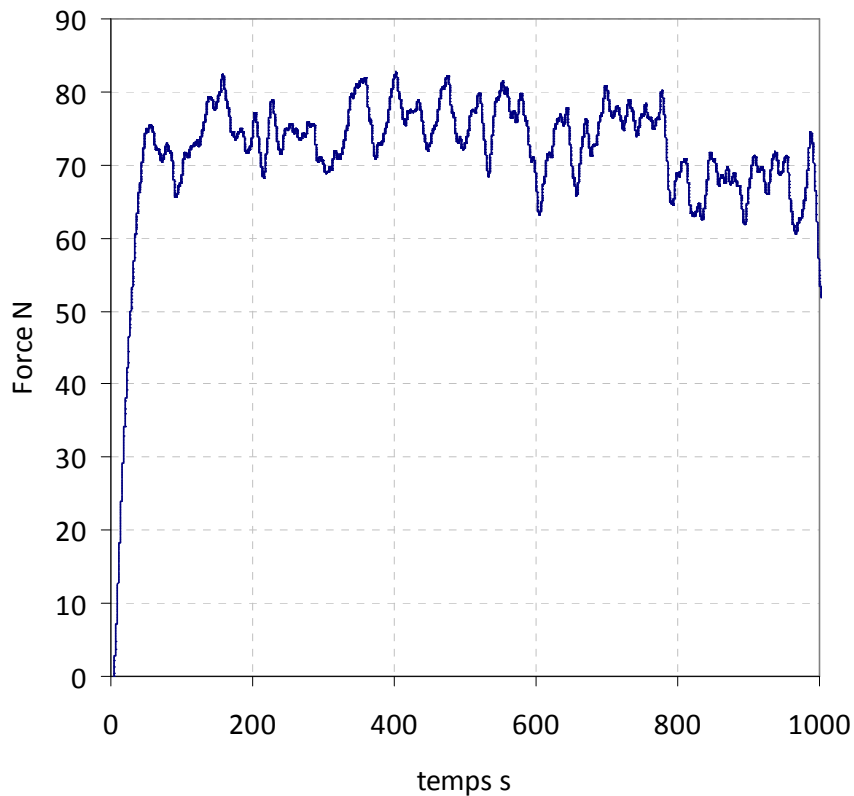


Figure 137: essai de traction à déplacement imposé à 1250°C. La vitesse équivalente est 5×10^{-4} mm/s.

De plus du fait des temps d'essai qui deviennent particulièrement longs (plus de 15min), nous n'avons pas réalisé une procédure d'analyse inverse sur ce type d'essai, mais pour l'essai réalisé à 1000°C, nous avons pu comparer l'expérience avec la simulation en utilisant les paramètres rhéologiques déterminés précédemment. Comme le montre la Figure 138, on observe un bon accord entre le calcul numérique et l'expérience.

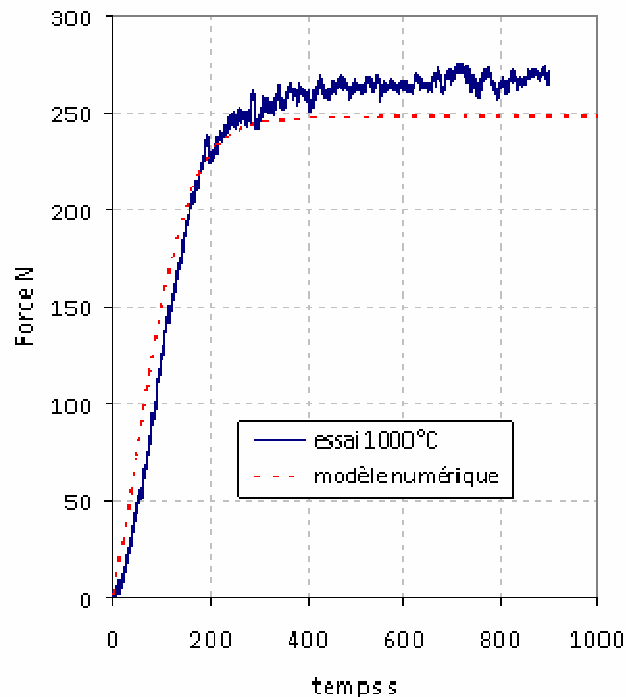


Figure 138: Comparaison expérience-numérique d'un essai de traction à déplacement imposé à 1000°C. La vitesse équivalente est 5×10^{-4} mm/s.

3.4 Essais de traction pour des températures supérieures à 1350°C

Pour réaliser des essais à des températures supérieures à 1350°C, nous sommes confrontés à d'autres problèmes ;

Comme nous l'avons vu, Taboo utilise un courant continu pour chauffer les éprouvettes et réguler la température, ce contrôle thermique étant effectué via un thermocouple soudés sur l'éprouvette. La perte de cette mesure retour, c'est-à-dire le thermocouple qui se désolidarise de l'éprouvette, entraîne deux configurations possibles :

- Les deux fils de thermocouples étant soudés l'un sur l'autre sur la surface de l'éprouvette, parfois seulement un des fils est dessoudé. Dans ce cas, il y a perte de mesure et l'essai s'arrête.
- Un autre cas est possible, les deux fils de thermocouple se désolidarisent de la surface de l'éprouvette mais restent en contact, auquel cas la température mesurée est la température de l'air ambiant ce qui représente une différence avec la consigne. Cette écart consigne/ mesure entraîne l'envoi de la pleine puissance et par conséquent une fusion de l'éprouvette.

Ces deux cas se produisent très fréquemment à haute température, ce qui représente une grande source d'échec des essais. Il faut donc trouver un autre moyen de réguler la température. Nous aurions pu utiliser la caméra thermique, mais cela représente une

3. Identification de paramètres rhéologiques sur des essais Taboo

incertitude trop grande dans la mesure du fait de l'évolution de l'émissivité due à l'oxydation et à son évolution avec la température.

Nous avons donc mis à profit un des désavantages du chauffage par effet Joule, à savoir l'existence d'un fort gradient thermique le long des éprouvettes. En effet comme nous l'avons remarqué tout au long des chapitres précédents il existe une différence significative de température entre le centre de l'éprouvette et les zones proches des mors.

L'idée est donc d'utiliser un thermocouple central servant au simple contrôle de la température (jusqu'à ce qu'il se désolidarise de la surface) ; ainsi qu'un autre thermocouple servant lui à la régulation. Ce second thermocouple est placé sur une zone où la température est moins élevée du fait de l'existence de ce gradient thermique.

Reste donc à déterminer la position et la température de régulation du nouveau thermocouple. Concernant la température, nous avons décidé de réguler toujours sur la même température, 1150°C. En conséquence nous avons uniquement modifié la position du thermocouple. Les positions des thermocouples ont été déterminées en utilisant la simulation numérique électrique thermique.

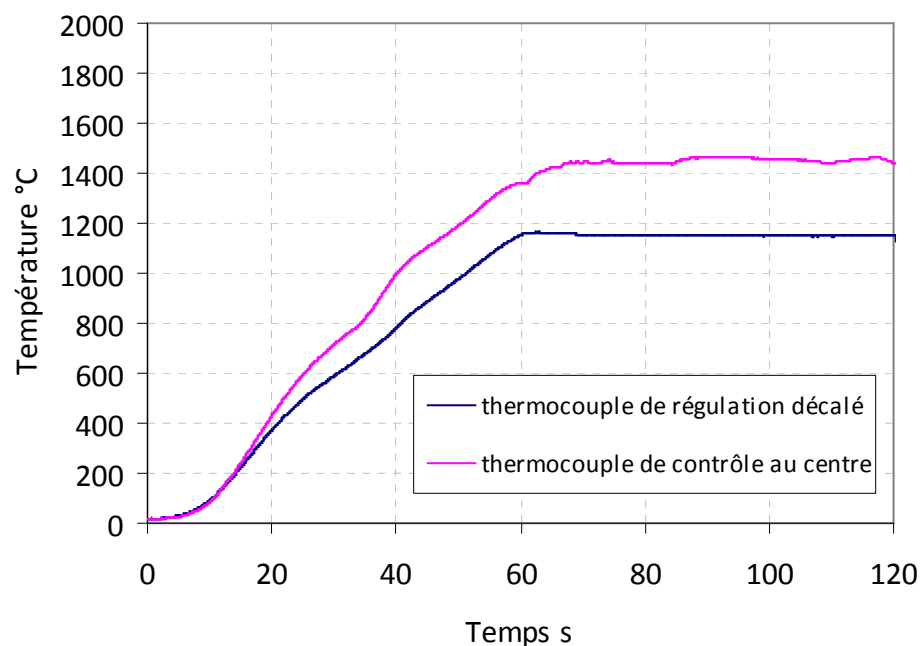


Figure 139: courbe de température lors d'une régulation sur un thermocouple décalé.

La figure 140 présente les enregistrements des températures du thermocouple central et du thermocouple déporté (ici soudé à 28.3 mm du bord de l'éprouvette). Cette position permet en théorie une régulation centrale à 1450°C. On remarque, sur la Figure 139, que la température au centre oscille autour de la valeur souhaitée. Donc bien que la régulation sur le thermocouple de régulation soit bonne, la température dans la zone manque d'une certaine précision. .

Néanmoins nous avons réalisé dans ces conditions des essais de traction pour une seule vitesse de traverse 0,05 mm/s. Nous n'avons pas pu réaliser des essais pour des vitesses plus faibles, car dans ce cas la force devenait trop faible pour le capteur (2500N).

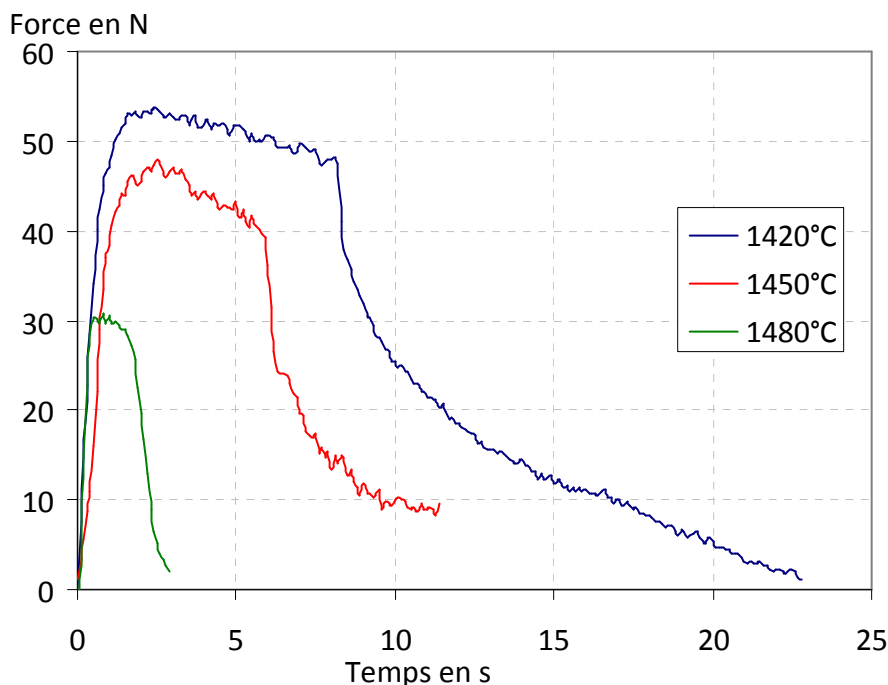


Figure 140: courbes de traction pour trois températures estimées sur un acier ST52.

Au vu des résultats obtenus, nous pouvons tirer différentes conclusions sur ce type d'essais dans les conditions et le protocole expérimental que nous utilisons :

- Les résultats sont obtenus pour des températures très élevées. Mais cette température n'est qu'une estimation car l'erreur sur la mesure peut être non négligeable
- De plus on note que lors des essais de traction des variations non négligeables de température peuvent être observées sur la zone centrale.
- Enfin, à ces températures les forces mesurées sont très faibles (50N maximum, ce qui représente seulement 2% de la capacité maximale du capteur), il existe donc une incertitude sur la valeur de force mesurée.

L'ensemble de ces remarques rendent les essais difficilement reproductibles et les résultats ne sont qu'une estimation des valeurs mesurées. Par conséquent nous ne proposerons pas d'exploitation de ces résultats en terme de comportement.

Pour des mesures à plus hautes températures, un autre problème est observé lors du chauffage. L'éprouvette se déforme légèrement la fusion de la zone centrale. En effet, même avec une régulation à force nulle, les moindres oscillations dans la régulation provoquent un fluage de l'éprouvette, et donc une évolution de la forme et de sa section. Ces évolutions influent tout naturellement sur l'écoulement du courant et donc sur le chauffage, le plus

souvent en provoquant dans la zone centrale une sur concentration de courant entraînant la fusion des échantillons.

Néanmoins nous pouvons imaginer des améliorations possibles pour rendre ce genre d'essais plus réalisables :

L'utilisation d'un capteur de force de capacité inférieure, mais pas trop faible pour qu'il résiste aux efforts pouvant être induits par de fortes variations de températures au cours d'un essai, comme par exemple un refroidissement de l'éprouvette dû à la perte de régulation suite au détachement du thermocouple de régulation.

On pourrait aussi imaginer une régulation plus lente, et plus progressive avec un retour plus fréquent vers l'utilisateur. Cette régulation ne serait plus en température, mais en intensité injectée. Ceci permettrait de brider l'intensité maximale, et d'éviter toute variation trop brutale lors du maintien près du point de fusion.

Enfin pour le contrôle de température il est à l'étude l'utilisation d'un emissivity Probes, qui semblerait il pourrait permettre de s'affranchir d'une mesure d'émissivité. Mais cette piste vient juste d'être abordée et mérite d'être approfondie.

4. Identification à partir des mesures de champs

Nous avons vu qu'il nous était possible avec la mesure speckles de trouver des champs de déplacement. Ces champs n'ont pas pu être pleinement utilisés lors des analyses présentées précédemment. En effet, lors de ces analyses nous ne disposions pas encore de moyens permettant l'identification à partir de mesures de champ. Ces moyens étaient en développés parallèlement dans le cadre la thèse d'Emile Roux.

Néanmoins, dans cette partie, nous effectuerons une revue des différentes méthodes utilisées pour l'identification de paramètres à partir de mesures de champ. En effet comme nous l'avons vu au chapitre 4 les récents développements, sur l'utilisation de caméra CCD et des techniques de mesures sans contact en tous genres, ont permis d'accéder à une information plus riche. En fait lors d'un simple essai de traction, l'information a été multipliée par 1000 si ce n'est plus (chaque point de mesure du champ apporte son information) et permet de résoudre des problèmes de non-unicité de la solution.

Par conséquent, l'utilisation des champs de déplacement ou de déformation pour l'identification de paramètres associés aux propriétés rhéologiques du matériau est un domaine de recherche en constante évolution et particulièrement actif, notamment en France au sein du groupe de recherche GDR CNRS 2519 « Mesure de Champs et identification en mécanique des solides » [Avril08]. Comme nous l'avons vu précédemment, comparée à une mesure globale (en force), une mesure de champ offre une plus grande flexibilité dans la recherche de paramètres.

Lors d'un essai homogène, c'est-à-dire un essai durant lequel la distribution de déformation est constante une approche en mesure de champs n'est pas nécessaire.

Néanmoins dans la majorité des cas, et en particulier pour nos essais Taboo, les champs de contraintes ou de déformations ne sont pas homogènes et par conséquent le lien existant entre les mesures et les paramètres des équations n'est pas explicite. Pour cela des méthodes ont été développées pour identifier des paramètres à partir de mesure de champs.

Dans ce chapitre, après une brève revue bibliographique, nous exposerons la méthode choisie au Cemef, ainsi qu'une application sur un essai de traction.

4.1 Méthodes d'identification à partir de mesures de champs

A. L'erreur en relation de comportement

Cette méthode a été initialement développée pour améliorer et estimer les erreurs des modèles éléments finis, notamment en utilisant des données oscillantes [Lad83] est ensuite apparue comme un puissant outil d'identification. Elle se base sur la minimisation d'une norme énergétique et peut servir pour l'identification de propriétés élastiques à partir d'un seul essai [Bonnet 03]. En élasticité, l'erreur en relation de comportement est définie comme une somme d'énergies potentielle et complémentaires. En l'absence de forces extérieures, celle-ci peut s'écrire, pour des champs de contraintes et de déplacements admissibles :

$$E(U, \sigma, C) = \frac{1}{2} \int_V (\sigma - C : \varepsilon(U)) : C^{-1} : (\sigma - C : \varepsilon(U)) dV \quad (124)$$

Le champ de déformation est mesuré par une mesure de champ, ou calculé à partir du champ de déplacement. Le champ de contraintes, quant à lui, est issu du modèle EF, pour un tenseur d'élasticité C donné, c'est-à-dire des paramètres élastiques E et ν . La minimisation de E donne la meilleure valeur de C .

Cette méthode est applicable une nouvelle fois uniquement à l'élasticité linéaire, ce qui dans notre cas n'est pas suffisant.

B. L'écart à l'équilibre

La méthode d'écart à l'équilibre [Claire04] est une méthode qui se base sur des mesures de champs de déplacement. A partir de ces données, il est possible de remonter à un champ de propriétés en un nombre fini de points de la surface étudiée.

Cette méthode repose sur l'écriture de l'équilibre mécanique à l'intérieur du système étudié. Le but est de trouver l'équilibre interne du système pour un champ de déformation donné, la variable d'ajustement étant les propriétés mécaniques. Cette relation d'équilibre conduit à un système d'équations linéaires à résoudre, dont les inconnues sont les propriétés mécaniques.

Cette méthode présentée par Claire et al. ([Claire04]) est utilisée dans le cadre de problèmes d'élasticité pour la détermination de paramètres d'endommagement sur des

composites [Cro08]. Elle s'avère non encore aboutie dans un cadre plus large comme celui relatif aux problèmes élasto-viscoplastiques ou d'endommagement ductile.

C. L'écart à la réciprocité

Cette méthode a été développée pour l'analyse de solides élastiques isotropes renfermant des fissures. Le principe de l'écart à la réciprocité [Andrieux97] consiste à écrire l'expression de Maxwell Betti, non pas entre deux solutions du problème élastique, mais entre une solution élastique sur le domaine sain et une solution élastique sur le domaine contenant potentiellement une fissure. Cette expression n'étant pas identiquement nulle, elle fournit une information sur les discontinuités de déplacement traversées par la fissure.

Nous ne développerons pas d'avantage cette méthode, qui est plus une méthode servant à détecter la présence de singularités plutôt qu'à identifier des paramètres matériaux.

D. La méthode des champs virtuels (MCV)

Cette méthode est basée sur le principe des puissances virtuelles qui sont appliquées sur un champ virtuel bien choisi. Cette méthode non itérative permet l'identification des propriétés mécaniques à partir de mesures de champs de déplacements [Grediac98]. Et contrairement au recalage élément finis, elle ne nécessite pas l'utilisation d'une simulation numérique. Pour un échantillon de volume V soumis à une force F , le principe des travaux virtuels impose quelque soit un champ de déplacement virtuel cinématiquement admissible u^* et son champ de déformations associé ϵ^* l'égalité entre travaux virtuels à l'intérieur et à la surface est vérifiée. On peut écrire :

$$-C_{ijkl} \int_V \epsilon_{kl} \epsilon_{ij}^* dV + \int_S T_i u_i^* dS = 0 \quad (125)$$

Cette expression est vraie pour tout champ virtuel cinématiquement admissible. De plus il existe une équation pour chaque champ virtuel. Pour un problème donné, les équations disponibles sont les suivantes :

Loi de comportement (exemple élastique)

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (126)$$

A partir des équations précédentes, on a P inconnues (E, ν, \dots). On peut choisir P champs virtuels et écrire un système de P équations à P inconnues :

$$\left\{ \begin{array}{l} -C_{ijkl} \int_V \epsilon_{kl} \epsilon_{ij}^{(1)*} dV + \int_S T_i u_i^{(1)*} dS = 0 \\ -C_{ijkl} \int_V \epsilon_{kl} \epsilon_{ij}^{(2)*} dV + \int_S T_i u_i^{(2)*} dS = 0 \\ \dots \\ -C_{ijkl} \int_V \epsilon_{kl} \epsilon_{ij}^{(P)*} dV + \int_S T_i u_i^{(P)*} dS = 0 \end{array} \right. \quad (127)$$

Cette forme permet de résoudre directement, inconnue par inconnue, le problème d'identification de chaque constante élastique. Des travaux récents ont permis d'étendre la méthode à des cas non linéaires [Cha06] et [Grediac06]. La principale difficulté de cette méthode est le choix des champs virtuels.

E. Recalage par éléments finis(REF)

Conceptuellement cette méthode est la plus intuitive. En effet elle consiste à réaliser plusieurs simulations éléments finis d'un essai réel afin de trouver les paramètres permettant aux champs solutions d'être les plus proches possibles.

Le but du recalage éléments finis est de minimiser une fonction coût en identifiant les paramètres relatifs au comportement du matériau, et ce en se basant sur une approche éléments finis. Concrètement, la méthode consiste à recalculer de façon itérative le champ de déformation ou de déplacement issu d'un calcul par éléments finis sur celui issu de mesures de champs [Pagnacco 09]. A chaque itération, à partir de l'erreur entre les données expérimentales et simulées les paramètres du modèle sont corrigés. Deux types de recalage élément finis sont à distinguer, d'une part une méthode basée sur le champ de force (REF-F), et une autre basée sur le champ de déplacement (REF-U).

La méthode en force (REF-F) se base sur une parfaite connaissance du champ de déplacements \hat{U} et de la force appliquée \hat{F} . Dans ce cas, on applique sur les bords du domaine EF, les déplacements mesurés expérimentalement. La fonction coût dans ce cas est simplement calculée à partir des forces mesurées et simulées.

L'autre méthode, REF-U, est une formulation en déplacement, dans ce cas on applique une force la force expérimentale sur le domaine EF et on compare les déplacements numériques et expérimentaux.

Il existe ensuite plusieurs approches généralisées mêlant les méthodes REF-F et REF-U. Giton et al. [Giton 06] et Pagnacco et al. [Pagnacco 07] propose des formulations généralisées, notamment la formulation multi-objectifs

En conclusion, l'identification par recalage élément finis, permet d'une part de traiter des géométries complexes, et d'autre part permet l'utilisation d'un champ de déplacements mesurés (il n'est pas nécessaire de connaître le champ de déformations).

Concernant les méthodes présentées ci-dessus, la formulation en effort présente l'avantage de ne pas être sensible aux mouvements de corps rigides, mais elle nécessite une parfaite connaissance du champ de déplacement et elle s'avère assez sensible aux bruits de mesure. La formulation en déplacement est quant à elle moins sensible aux bruits de mesure. Elle permet d'utiliser des mesures incomplètes en déplacement, mais en contre partie elle s'avère être sensible aux mouvements de corps rigide et elle est toujours résolue de manière itérative.

L'approche par recalage permet une grande flexibilité dans le type d'essais exploités. Ceci peut s'avérer particulièrement intéressant lorsque l'on souhaite réaliser des essais plus complexes faisant varier le taux de triaxialité des contraintes par exemple.

Parmi les méthodes présentées ci-dessus, le recalage par éléments finis est une méthode qui permet de travailler dans le cadre de problèmes non linéaires et mettant notamment en jeu de grandes déformations plastiques. En effet, les autres méthodes proposées ne sont exploitables que dans un cadre de petites déformations linéaires, ou sont encore en cours de développement pour des problèmes non-linéaires.

La formulation généralisée est plus souple, les mesures cinématiques ne sont utilisées qu'aux bords ; cette approche est donc particulièrement intéressante en 3D avec des mesures de surface.

4.2 Exploitation des mesures de champs

Au cemef une méthode basée sur le recalage éléments finis a été choisie. En effet, parmi les méthodes présentées ci-dessus, le recalage par éléments finis, est une méthode qui permet de travailler dans le cadre de problème non linéaire et mettant notamment en jeu de grande déformation. En effet les autres méthodes proposées ne sont exploitables que dans un cadre de petites déformations linéaires, ou sont encore en cours de développement pour des problèmes non-linéaires.

A. Données disponibles

Les mesures de champs permettent d'obtenir l'évolution des champs de déplacement tout au long de l'essai mécanique (Figure 141).

Ainsi dans le contexte des essais rhéologiques sur éprouvette plane (ce qui est le cas sur Taboo) le champ de déplacement est disponible sur une face, avec une résolution temporelle dépendante de la fréquence d'échantillonnage de la caméra, et une résolution spatiale fixé par la taille des fenêtres de corrélation et leurs taux de recouvrement.

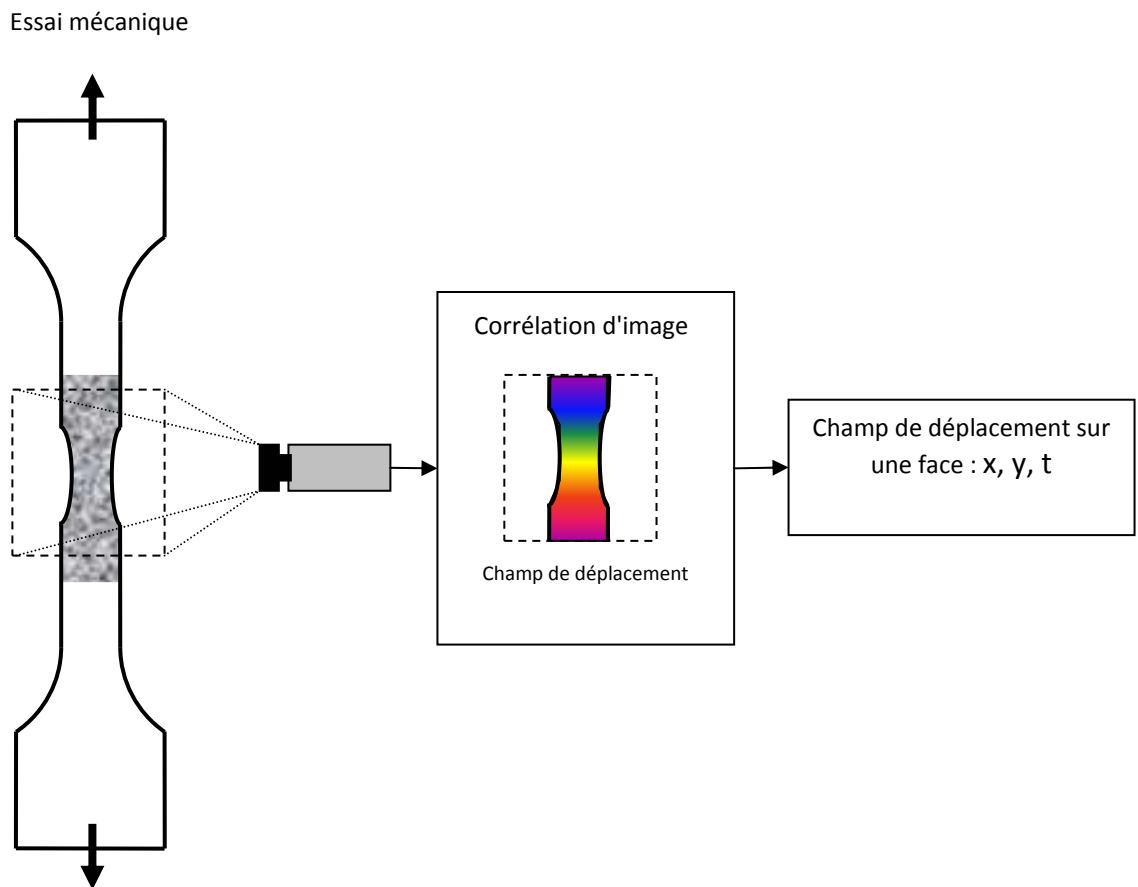


Figure 141 : Schéma de l'acquisition d'une mesure de champs [roux11]

Le champ de déplacement ainsi obtenu est projeté sur un maillage élément finis pour pouvoir être comparé avec les résultats numériques. Ce champ de déplacement mesuré sert aussi comme condition limite du calcul éléments finis.

Pour réaliser ce pilotage une portion de l'éprouvette est modélisée par élément finis. On applique les déplacements mesurés expérimentalement sur les bords de cette portion d'éprouvette, comme illustré à la Figure 144.

Les informations provenant de mesure de champ sont uniquement suivant deux dimensions, il est donc nécessaire de faire une hypothèse sur le déplacement dans la troisième dimension (l'épaisseur de l'éprouvette), le modèle élément finis étant en 3 dimensions.

On fait donc les hypothèses suivantes :

- les déplacements (suivant l'axe x et y) observés en surface sont invariant dans l'épaisseur de l'éprouvette, des conditions limites identiques sont donc appliquées suivant toute l'épaisseur de l'éprouvette.
- le déplacement suivant l'épaisseur est laissé libre.

4. Identification à partir des mesures de champs

La méthode mise en place ici impose le pas de temps du calcul par éléments finis. En effet celui-ci est imposé par la fréquence d'acquisition de la prise de vue. Cette procédure de pilotage est donc appliquée à chacun des incréments de calcul.

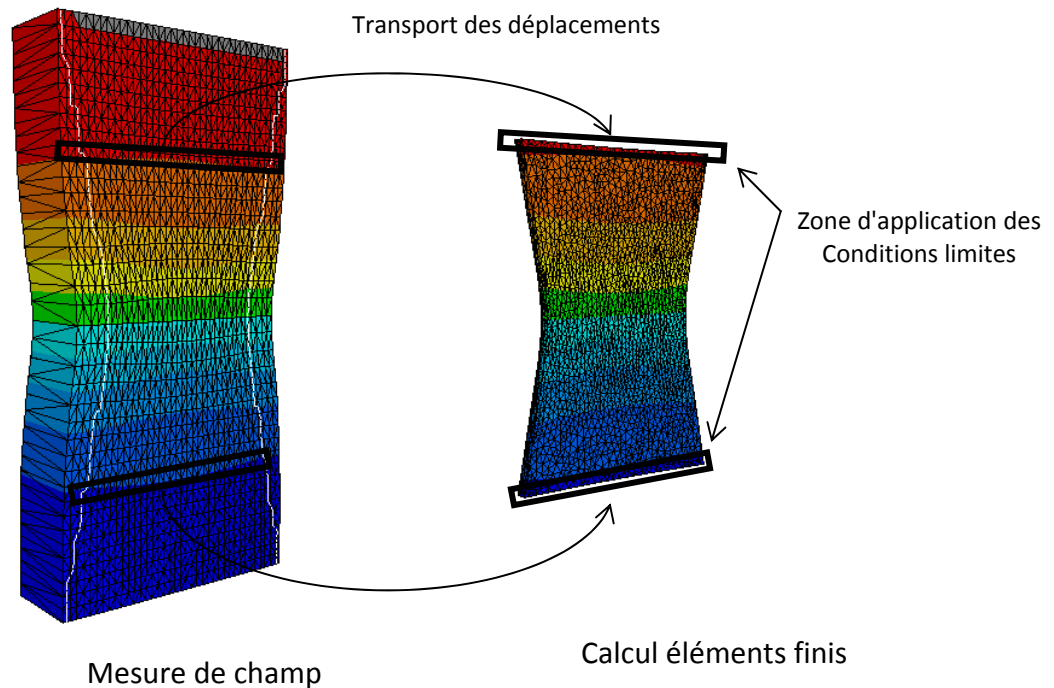


Figure 142 : Principe du pilotage de simulation éléments finis avec des mesures de champ [Roux11]

Cette approche a plusieurs intérêts, elle permet notamment :

- de s'affranchir des mouvements de corps rigide : le mouvement de corps rigide expérimental est retranscrit automatiquement sur le calcul éléments finis.
- la modélisation entière de l'éprouvette n'est pas nécessaire, la réduction du domaine permet de réduire le temps de calcul.

Cette approche a aussi des inconvénients :

- à l'état initial, la coïncidence des géométries expérimentale et numérique doit être la meilleure possible.
- Le pilotage en déplacement est sensible au bruit de mesure, un bruit trop important peut créer des déplacements locaux (sur la zone de pilotage) non continus et ainsi créer des contraintes et déformations non physiques. Dans la plupart des cas un filtrage des données expérimentales est donc nécessaire.

B. Construction d'une fonction coût adaptée aux mesures de champ

a) Formulation

L'étape suivante dans l'exploitation des mesures de champs est de mettre en place une fonction coût adaptée aux mesures de champs, c'est-à-dire qui est capable d'évaluer l'écart entre une carte de déplacement numérique et expérimental.

Pour réaliser cette évaluation on dispose chaque incrément d'une carte de déplacement expérimentale rattachée au maillage régulier issue de la prise de vue, et d'une carte de déplacement numérique rattachée au maillage courant du calcul éléments finis. On projette le champ de déplacement obtenu expérimentalement sur le maillage élément finis. Cette étape est nécessaire pour pouvoir comparer des déplacements aux mêmes points. Par mêmes point ils s'entend un même nœud de maillage si le maillage EF et le maillage servant à l'analyse sont coïncidents, ou en certains points où la valeur du champ EF est interpolé Une fois les deux champs de déplacement exprimés sur le même maillage on peut évaluer la contibution de l'erreur en déplacement à la fonction coût comme suit:

$$fc_{MDC} = \omega_x fc_x(P) + \omega_y fc_y(P)$$

avec

$$fc_x(P) = \sum_{t=1}^T \left(\frac{\sum_{i=1}^n \delta_i \cdot (Ux^{mdc}(i) - Ux^{num}(i))^2}{\sum_{i=1}^n (Ux^{mdc}(x_i))^2} \right) \quad (128)$$

$$fc_y(P) = \sum_{t=1}^T \left(\frac{\sum_{i=1}^n \delta_i \cdot (Uy^{mdc}(i) - Uy^{num}(i))^2}{\sum_{i=1}^n (Uy^{mdc}(i))^2} \right)$$

ou T est le nombre de clichés, n est le nombre de points de mesure, δ_i la valeur binaire sur la disponibilité de la mesure valant 0 ou 1, ω_x et ω_y la pondération donnée aux composantes du déplacement, Ux_i^{num} et Uy_i^{num} les déplacements suivant les deux axes issus du calcul éléments finis, et Ux_i^{mdc} et Uy_i^{mdc} ceux issus des mesures de champ. Afin de ne pas surcharger les notations, l'indice d'incrément temporel t n'a pas été écrit : les grandeurs Ux_i^{num} , Uy_i^{num} , Ux_i^{mdc} , Uy_i^{mdc} et δ_i sont dépendantes de t .

Ces expressions de la fonction coût peut être intégrée dans une fonction coût plus globale comprenant l'écart sur la force, comme celle exprimée à l'équation 118

4.3 Vers l'identification d'une mesure de champs par une méthode de recalage EF

Nous présentons ici une identification menée sur une nuance d'acier utilisée dans la thèse d'Emile Roux . Cette identification est réalisée à partir d'une mesure de champ. L'essai de traction servant à l'identification est le même que celui réalisé pour la validation à froid des speckles (chapitre 4). Afin d'avoir un champ sur la globalité de l'éprouvette, le mouchetis étudié est un mouchetis de peinture analysé sur Aramis.

Les simulations numériques quant à elles sont exécutées sur CimLib, avec comme modèle rhéologique une loi puissance comme présentée ci-dessous :

$$\sigma = \sigma_y + K\varepsilon^n \quad (129)$$

Les paramètres E et ν sont égaux respectivement à 200GPa et 0.3. Une analyse de sensibilité par rapport aux paramètres du modèle d'écrouissage est réalisée. 240 évaluations du modèle direct sont effectuées. L'identification pour la partie écrouissage est effectuée jusqu'à un temps $t=80s$. Les surfaces de réponse ainsi obtenues sont présentées Figure 145. Pour chacun des couples de paramètres, les différentes contributions de la fonction coût sont détaillées. Ainsi, nous observons dans les trois premières colonnes, la fonction coût relative à la force fc_F , relative aux déplacements en X fc_x , et relative aux déplacements en Y fc_y , et dans la dernière colonne la fonction coût globale. Cette fonction coût globale est une somme pondérée des différentes contributions les poids sont choisis égaux pour ces tests : $\omega_x = \omega_y = \omega_F = \frac{1}{3}$.

$$fc(P) = \omega_x fc_x(P) + \omega_y fc_y(P) + \omega_F fc_F(P) \quad (130)$$

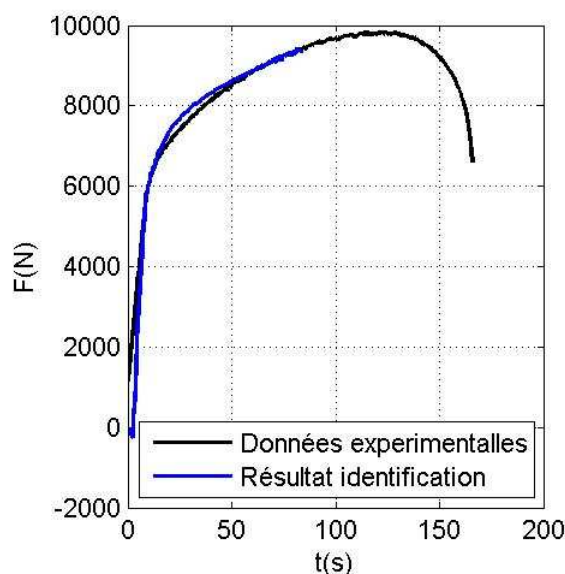


Figure 143 : Effort de traction sur éprouvette de traction - Identification de la loi d'écrouissage [Roux11]

Les résultats sont relativement bons par rapport à la force (Figure 143) : la fonction coût est de $fc_F = 0.019$. En revanche l'erreur sur les champs de déplacement est plus importante : $fc_x = 1.82$ et $fc_y = 1.19$. Cet écart apparaît sur les cartes Figure 144.

Il est notamment important sur les champs de déplacement suivant x (Figure 144a), l'erreur maximum est de 0.15mm pour une mesure de l'ordre de 0.42mm soit une erreur relative de 35%.

Sur le champ déplacement suivant y (Figure 144b), l'erreur maximale est de 0.05mm pour une mesure de l'ordre de 1mm soit une erreur relative de 5%.

Les écarts observés peuvent être expliqués par plusieurs causes :

- Le matériau testé présente une certaine anisotropie notamment orthotropie, dûe par exemple au laminage, phénomène que le modèle de comportement ne retranscrit pas.
- Les mesures réalisées sont biaisées par la technique de mesure, ou d'analyse.

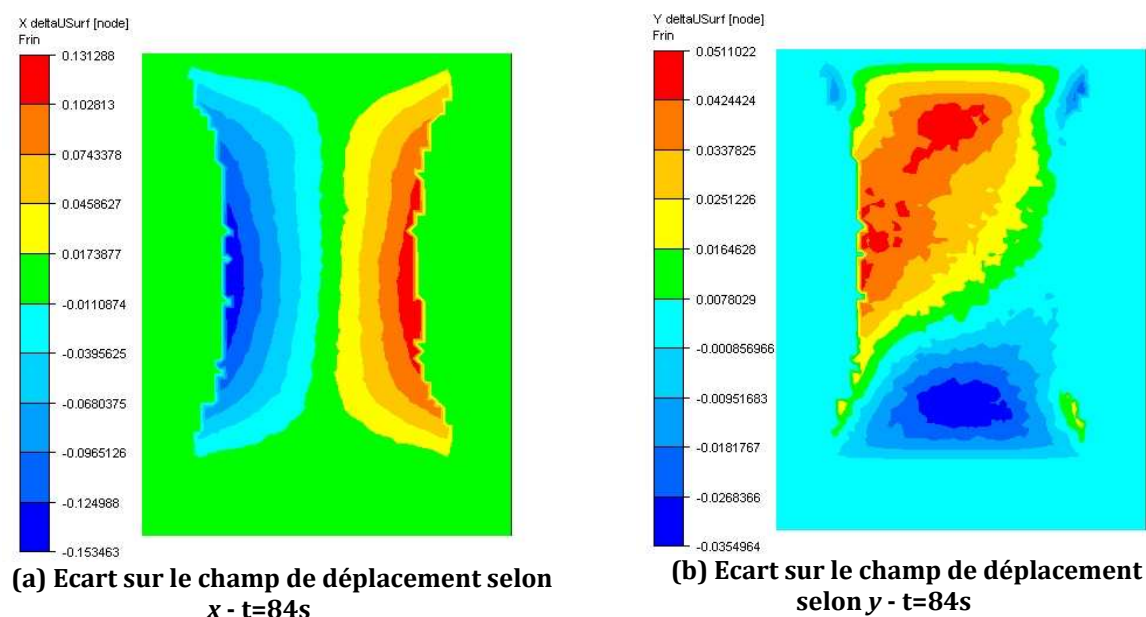


Figure 144 : Résultat d'identification - champs de déplacement[Roux11]

4. Identification à partir des mesures de champs

Paramètres	Plage de recherche	Paramètres identifiés	Nombre de calcul du modèle direct
σ_y (MPa)	[40 200]	147 MPa	98 calculs du modèle direct / 15 itérations
K (MPa)	[100 800]	430 MPa	
n	[0.15 1]	0.47	

Tableau 8 : Bornes de recherche et résultat de l'identification des paramètres

Le tracé des surfaces de réponse construites pendant l'identification permet de faire plusieurs remarques :

- Surface de réponse relative à la force (Figure 146, colonne 1) : La forme des ces trois surfaces est comparable à celle obtenue lors de l'étude de sensibilité. Les vallées présentes sont moins prononcées. Sur chacune de ces surfaces le minimum détecté, par rapport à la fonction coût global, est représenté par une croix bleue.
- Surfaces de réponse relative aux champs de déplacement (Figure 146, colonne 2 et 3) : les valeurs sont toutes élevées.
 - Les surfaces de réponse relatives au déplacement U_x (Figure 146, colonne 2) présentent une sensibilité relativement faible, et apportent donc peu d'information supplémentaire.
 - Les surfaces de réponse relatives au déplacement U_y (Figure 146, colonne 3) présente une sensibilité plus significative. Ces surfaces présentent chacune un minimum bien défini et sont donc une source d'information supplémentaire.
- Surfaces de réponse relative à la fonction coût globale (Figure 146, colonne 4) : La forme de ces trois surfaces montre un problème d'optimisation relativement simple à résoudre. Il est cependant important de garder à l'esprit que la solution obtenue est fortement liée à la pondération des différentes contributions.

5. Conclusion

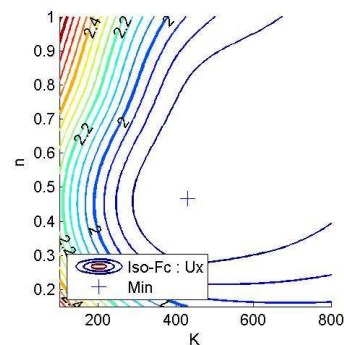
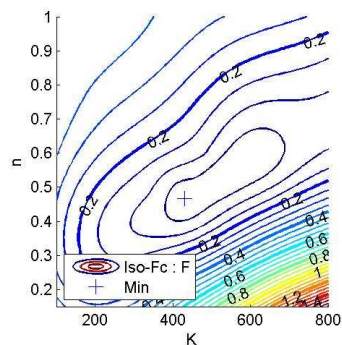
En conclusion de ce chapitre, nous avons pu voir que la chaîne de mesure sur Taboo, y compris la mesure speckles, permet l'identification des paramètres rhéologiques, y compris le module d'Young. Il pourrait être intéressant de voir l'influence de la loi de comportement, mais cela implique d'implémenter de nouvelles lois de comportement dans Forge. Néanmoins la loi utilisée de type élasto-viscoplastique multiplicative semble offrir des résultats totalement satisfaisants exceptés durant les périodes de relaxation.

Le développement de méthodes d'identification basées sur des champs complets, tel que la méthode présentée en perspective, permettrait d'avoir accès à une information plus riche, et ainsi pouvoir identifier des paramètres plus fins.

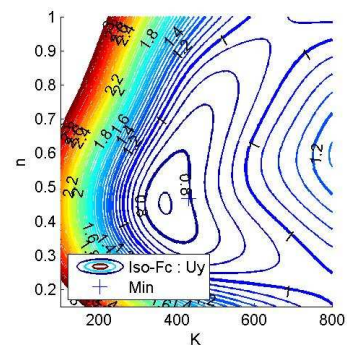
Par contre, il semble très difficile d'explorer, dans l'état actuel des développements Taboo, l'état pâteux. En effet, nous avons vu que les essais à hautes températures sont très difficiles à mener, les moindres petites variations dans la section entraînent une surchauffe des éprouvettes jusqu'à leur ruine. De plus même si l'utilisation d'un thermocouple déporté permet de réguler durant la période de chauffage, celui-ci ne permet pas un bon maintien de la température durant l'essai.

Légende page suivante : Figure 145 : Identification de la loi de plasticité - surface de réponse - contributions des fonctions coûts

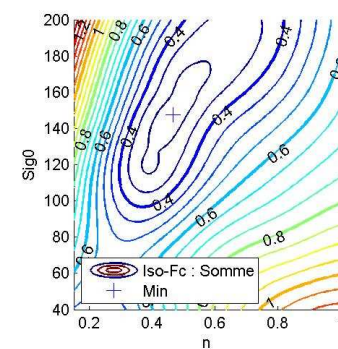
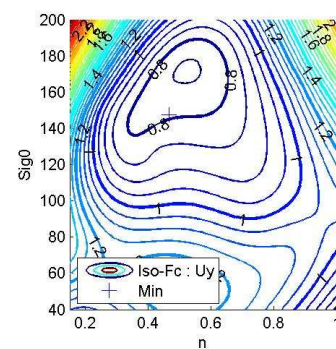
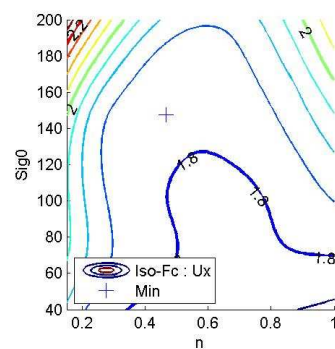
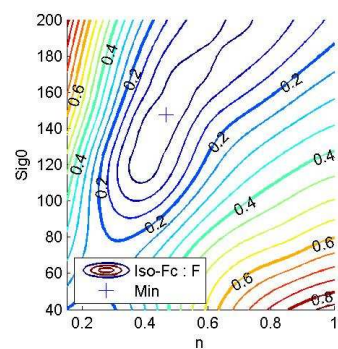
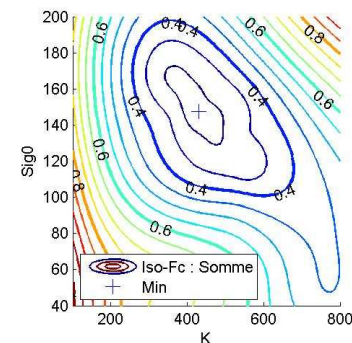
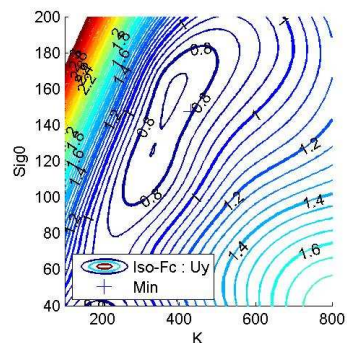
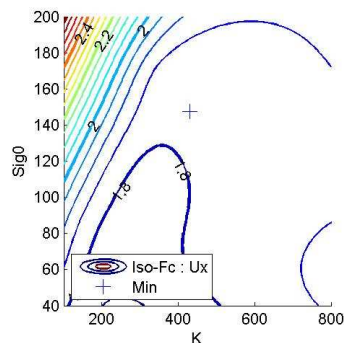
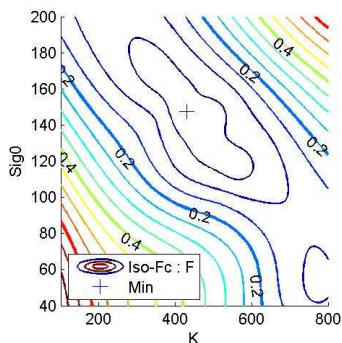
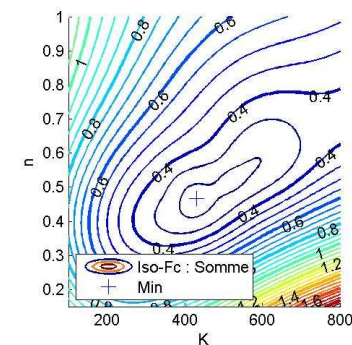
Déplacement U_x
(direction transverse à la traction)



Déplacement U_y
(direction de traction)



**Fonction coût globale
(Moyenne pondérée)**



Bibliographie

- [Andrieux97] : S. Andrieux, A. BenAbda, H. Bui, (1997), On the identification of planar cracks in elasticity via reciprocity gap concept , *COMPTES RENDUS DE L ACADEMIE DES SCIENCES SERIE I-MATHEMATIQUE*, **324**, pp.1431-1438.
- [Avril08] : S. Avril, M. Bonnet, A.-S. Bretelle, M. Grediac, F. Hild, P. Ienny, F. Latourte, D. Lemosse, S. Pagano, E. Pagnacco, F. Pierron, (2008), Overview of identification methods of mechanical parameters based on full-field measurements , *EXPERIMENTAL MECHANICS*, **48**, pp.381-402.
- [Chalal06] : H. Chalal, S. Avril, F. Pierron, F. Meraghni, (2006), Experimental identification of a nonlinear model for composites using the grid technique coupled to the virtual fields method , *COMPOSITES PART A-APPLIED SCIENCE AND MANUFACTURING*, **37**, pp.315-325.
- [Claire04] : D. Claire, F. Hild, S. Roux, (2004), A finite element formulation to identify damage fields: the equilibrium gap method , *INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN ENGINEERING*, **61**, pp.189-208.
- [Crouzeix08] : L. Crouzeix, (2008), Identification de champs de propriétés mécaniques de structures composite à partir de mesures de champs de déplacement, thèse de doctorat, *université de Toulouse III - Paul Sabatier*.
- [Forestier04] : R. Forestier, (2004) Développement d'une méthode d'identification de paramètres par analyse inverse couplée avec un modèle éléments finis, *thèse de doctorat Mines-ParisTech - CEMEF*.
- [Francois93] : D. Francois, A. Pineau A. Zaoui Viscoplasticité, endommagement, mécanique de la rupture, mécanique du

contact, *Comportement mécanique des matériaux*, vol. 2, ed. Hermès, 1993.

- [Giton06] : M. Giton, A.S. Caro-Bretelle, P. Ienny, (2006), Hyperelastic behaviour identification by a forward problem resolution: Application to a tear test of a silicone-rubber , *STRAIN*, **42**, pp.291-297.
- [Grediac06] : M. Grediac, F. Pierron, (2006), Applying the virtual fields method to the identification of elasto-plastic constitutive parameters , *INTERNATIONAL JOURNAL OF PLASTICITY*, **22**, pp.602-627.
- [Grediac98] : M. Grediac, F. Pierron, (1998), A T-shaped specimen for the direct characterization of orthotropic materials , *INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN ENGINEERING*, **41**, pp.293-309.
- [Holland75] : H.J. Holland, *Adaptation in natural and artificial system*, Ann Harbor, The University of Michigan Press, 1975.
- [Kinoshita79] K Kinoshita, T.Emi; M.Kasai (1979) Thermal elasto-plastic stress analysis of solidifying shell in continuous casting mold. *Tetsu-to-Hagane*, **65**, pp2022-2031
- [Ladeveze83] : P. Ladeveze, D. Leguillon, (1983), ERROR ESTIMATE PROCEDURE IN THE FINITE-ELEMENT METHOD AND APPLICATIONS , *SIAM JOURNAL ON NUMERICAL ANALYSIS*, **20**, pp.485-509.
- [Mizukami77] H Mizukami, K Murakami, Y Miyashita. 1977Elastic modulus of steels at high temperature. *Tetsu-to-Hagané*; **63**
- [Nelder65] J. A. Nelder and R. Mead, (1965) A simplex method for function minimization, *Computer Journal*, **7**, pp308.

- [Pagnacco09] : E. Pagnacco, A. Caro-Bretelle, (2009), Identification par Recalage de Modèles Eléments Finis , *Ecole thématique CNRS "Identification à partir de mesures de champs -Application à la mécanique des matériaux et des structures"*, , .
- [Pagnacco07] : E. Pagnacco, A. Moreau, D. Lemosse, (2007), Inverse strategies for the identification of elastic and viscoelastic material parameters using full-field measurements , *Materials Science and Engineering: A*, **452-453**, pp.737 - 745.
- [Roux10] E. Roux, (2011), thèse en cours à Mines Paris-Tech-Cemef
- [Saint-Germain06] B. Saint-Germain, (2006) Etude expérimentale et numérique des distorsions de structure mécano-soudées, Thèse de l'école Centrale de Paris

Chapitre 6 : Apport micro de la dynamique moléculaire

L'utilisation de la dynamique moléculaire est un outil puissant pour déterminer certains paramètres physiques et plus particulièrement ceux difficilement accessibles en laboratoire. Ceci est particulièrement le cas en solidification, et plus particulièrement lors de l'étude de la cavitation et la fissuration à chaud qui nous intéressent.

Certaines simulations telles que nous les avons présentées au chapitre précédent permettent de décrire des phénomènes macroscopiques en se basant sur des lois empiriques. D'autres simulations, à l'échelle mésoscopique, permettent, elles, d'appréhender des phénomènes plus locaux sans pour autant pouvoir décrire des phénomènes physiques à l'échelle atomique. Ce dernier point peut s'avérer nécessaire si l'on souhaite, comme dans le cas de la fissuration à chaud comprendre l'origine des cavités et des fissures en zone interdendritique, ou bien encore comprendre l'action d'éléments d'alliage.

Pour cela, nous nous sommes intéressés aux techniques de simulation par dynamique moléculaire, car elles ont l'avantage de prendre en compte explicitement les interactions inter atomiques. Pour simuler de façon réaliste un solide avec ces approches, il faut disposer d'un modèle d'interaction entre atomes. Nous discuterons des modèles existants pour le fer, puis nous présenterons le potentiel utilisé.

A titre d'exemple pour notre étude, le fer, à l'état solide, sera toujours considéré dans sa structure cubique faces centrées (CFC), appelée gamma. Nous traiterons également le comportement de l'état fondu et de l'interface cristal fondu impliqué lors de la croissance cristalline.

1. La dynamique moléculaire « classique »

1.1 Principes

Considérons un ensemble de N particules en interaction dans un volume V . En l'absence de forces extérieures agissant sur le système, l'énergie totale du système est conservée. Les propriétés du système sont donc définies dans un ensemble microcanonique (NVE). Un ensemble est dit NVE lorsqu'on considère un système composé d'un nombre de particules N placées dans un volume V constant ayant une énergie totale E constante. La dynamique moléculaire effectue une résolution temporelle des équations de mécanique newtonienne avec une énergie cinétique et une énergie potentielle. C'est un système d'oscillateurs couplés.

Au temps t , chaque atome i de coordonnées $\mathbf{r}_i=(x_i,y_i,z_i)$ et de masse m_i subira une accélération \mathbf{a}_i sous l'effet des forces extérieures appliquées par les autres atomes, telle que

$$\mathbf{F}_i = m_i \mathbf{a}_i = m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} \quad (131)$$

où \mathbf{F}_i est la résultante des forces agissant sur l'atome i .

En considérant que ces forces sont conservatives, c'est-à-dire qu'elles dérivent d'un potentiel et qu'elles conservent l'énergie, la force \mathbf{F}_i s'exerçant sur l'atome i peut être déterminée par dérivation de la fonction énergie potentielle :

$$\mathbf{F}_i = -\nabla U_i$$

avec

$$U_i = \sum_{j \neq i}^N U(\mathbf{r}_{ij})$$

De plus, si l'on considère que l'énergie potentielle du système s'écrit comme une fonction continue des distances relatives entre atomes, alors l'équation précédente peut s'écrire :

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j \neq i}^N F_{ij} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} \quad (133)$$

où r_{ij} représente la distance séparant l'atome i d'un atome j , $r_{ij} = |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i| = |\mathbf{r}_{ij}|$

Pour un système à N atomes, donc $3N$ degrés de liberté, il faut résoudre $3N$ équations différentielles couplées. En supposant que les vitesses, les positions et les accélérations peuvent être développées en série de Taylor, les positions et les accélérations au temps $t + \Delta t$ sont calculées grâce à l'algorithme de Verlet [Verlet67]. En fait, ces nouvelles positions

et accélérations au temps t sont calculées à partir de celles du temps $t - \delta t$ et du temps t comme expliqué ci-dessous.

Pour une vitesse moyenne V_i de l'atome i sur l'intervalle $[t, t + \delta t]$, la position r_i d'un atome à l'instant $t + \delta t$ est définie par :

$$\mathbf{r}_i(t + \delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{V}_i(t)\delta t + \delta t^2 \frac{\mathbf{a}_i(t)}{2} + \dots \quad (134)$$

On peut écrire un développement identique pour $t - \delta t$

$$\mathbf{r}_i(t - \delta t) = \mathbf{r}_i(t) - \mathbf{V}_i(t)\delta t + \delta t^2 \frac{\mathbf{a}_i(t)}{2} - \dots \quad (135)$$

En additionnant les deux expressions précédentes, on trouve une nouvelle expression ne faisant plus intervenir la vitesse :

$$\mathbf{r}_i(t + \delta t) = 2\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(t - \delta t) + \delta t^2 \mathbf{a}_i(t) \quad (136)$$

L'initialisation du calcul nécessite de connaître 6N conditions initiales. Pour un cristal, cela signifie de connaître les 3N positions d'atomes et de leur imposer 3N composantes de vitesses. Les vitesses sont tirées au hasard dans une distribution de Boltzmann centrée sur la valeur $v_0 = \sqrt{\frac{k_b T}{m}}$. Il s'agit de la distribution des vitesses vers laquelle tout système microcanonique doit tendre.

Le pas d'intégration est au plus égal à un dixième de la période de vibration élémentaire la plus courte du système, soit quelques femto-secondes. Il δt est choisi de l'ordre d'une femto seconde. Ce choix permet une bonne résolution des équations du mouvement, c'est-à-dire une conservation de l'énergie totale du système. Cependant, comme le pas de temps est très petit, nous nous trouvons très vite confrontés à une des limitations de la dynamique moléculaire, à savoir des temps de calcul importants pour des temps de simulation faibles (faibles durées réelles).

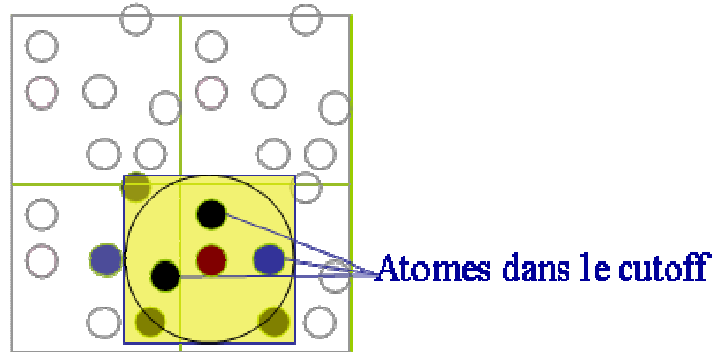


Figure 146: illustration de la notion de cut-off ainsi que de la notion de périodicité du réseau

La représentation d'un solide à la limite thermodynamique nécessiterait environ 10^{23} atomes (c'est-à-dire le nombre d'Avogadro). Ce qui malgré les avancées technologiques et l'utilisation des clusters reste inatteignable. Pour l'ensemble de nos simulations, nous nous sommes contentés de systèmes dont les tailles sont de quelques milliers d'atomes, voire quelques dizaines de milliers d'atomes. Des conditions périodiques sont utilisées pour traiter des milieux denses tout en ayant un système contenant un nombre fini de particules. Les atomes sont contenus dans des boîtes parallélépipédiques répliquées dans les trois directions de l'espace. Néanmoins pour éviter toute interaction d'un atome avec lui-même ou avec l'un de ses plus proches voisins « images » (c'est-à-dire issus de la réplique), la taille des boîtes doit être au moins le double du rayon de cut-off. Le rayon de cut-off étant le rayon du volume de contrôle incluant les atomes sur lesquels vont être calculées les interactions avec l'atome central courant (Figure 146).

1.2 Les grandeurs thermodynamiques

Pour l'étude d'un ensemble statistique, le principe d'ergodicité postule l'équivalence, à l'équilibre, entre moyennes temporelles prises sur les trajectoires (Boltzmann) et les moyennes d'ensemble calculées dans l'espace des configurations (Liouville). La dynamique moléculaire permet d'accéder à plusieurs grandeurs thermo physiques.

La température T : elle est directement reliée à la moyenne temporelle de l'énergie cinétique du système (donc à la quantité de mouvement de l'atome p_i) :

$$T = \frac{2}{3Nk_b} \left\langle \sum_i^N \frac{|\mathbf{p}_i|^2}{2m_i} \right\rangle \quad (137)$$

La pression P est quant à elle obtenue à l'aide du théorème du Viriel [Collins78]

$$P = \left\langle \frac{Nk_b T}{V} \right\rangle - \left\langle \frac{1}{3V} \sum_i^N \sum_{j \neq i} \mathbf{r}_{ij} \frac{\partial U(\mathbf{r}_{ij})}{\partial r_{ij}} \right\rangle \quad (138)$$

Afin d'être plus proches des conditions expérimentales, en termes de température et de pression, les simulations sont réalisées essentiellement à température imposée. La pression est généralement imposée (ensemble thermodynamique de Gibbs (NPT)) et plus rarement le volume (statistiques canoniques (NVT)). Il faut donc changer d'ensemble thermodynamique en régularisant la température, donc les vitesses moyennes des atomes en utilisant un thermostat virtuel qui modifie les équations de l'algorithme de Verlet. Le thermostat de Nosé-Hoover [Nosé84] introduit un hamiltonien virtuel avec lequel il échange de l'énergie. L'énergie gagnée ou perdue par le milieu est calculée ; elle correspond à un échange avec l'extérieur. C'est un thermostat qui conserve l'énergie : énergie du système et énergie échangée. Il est compatible avec la réversibilité des équations de la mécanique newtonienne. De même la pression peut être régulée en laissant varier le volume et en régulant les vitesses avec un barostat.

2. Les limites de la dynamique moléculaire

Même si nous l'avons laissé entrevoir dans le paragraphe précédent, nous rappelons ici que l'utilisation de méthodes telles que la dynamique moléculaire nécessite d'être conscient de leurs limites. En effet si elle offre de grandes possibilités d'investigation, elle est limitée à une échelle spatiale définie par le nombre d'atomes et de temps, quelques nanosecondes voire quelques dizaines de nanosecondes. Par conséquent elle permet d'analyser finement des phénomènes locaux, voire très rapides.

Comme le montre l'équation (131) au cours d'une simulation, les atomes se déplacent sous l'effet des forces qui vont, par le fait du mouvement atomique, elles-mêmes évoluer. Ces changements interviennent rapidement. Comme nous l'avons vu précédemment, les pas de temps utilisés sont très faibles (environ 1 femto seconde). On peut comparer cette valeur aux fréquences de vibrations atomiques qui correspond à 100 fs. Donc, pour simuler un phénomène d'une durée de quelques ns, le nombre d'itérations devient important et l'analyse nécessite un temps de calcul qui peut s'avérer prohibitif.

Les tailles actuelles des systèmes ne dépassent que très rarement le million d'atomes. Ceci représente les plus gros systèmes utilisés, plus classiquement des tailles de système de l'ordre de quelques dizaines de milliers d'atomes sont utilisés. Ces chiffres qui peuvent paraître importants sont en réalité à relativiser. En effet, nous avons construit un système de 10^6 atomes, mais ceci ne représente qu'un cristal parallélépipédique de seulement 250 Å de côté.

Reste le choix du champ de force et des paramètres qui décrivent la physique d'un matériau. La physique du matériau est contenue dans ce choix. Il dépend de la nature des atomes et des types de liaisons (chimique, métallique, ionique) et d'interactions entre atomes (van der Waals, électrostatique, magnétique) qui les lient.

3. Les potentiels utilisés dans la bibliographie pour décrire le comportement du fer

La valeur des calculs de dynamique moléculaire repose en grande partie sur la qualité des potentiels interatomiques choisis. De manière générale, les potentiels les plus simples, les potentiels de paires sont utilisés pour des systèmes monoatomiques à structure dense. Cependant il est souvent nécessaire pour une meilleure description des propriétés thermophysiques des métaux d'aller au-delà de l'approximation à deux corps. Et ce particulièrement pour la composante attractive des potentiels.

3.1 Les potentiels de paires

De façon simple et empirique, l'énergie de cohésion du cristal est parfois représentée comme une somme d'interactions de paires entre les atomes. Le potentiel de paire le plus connu est celui de Lennard-Jones [Lennard- Jones²⁴]. Même si ces potentiels ont parfois été

utilisés sur des métaux lorsque ceux-ci sont très denses [Johnson 64], ils sont principalement utilisés pour modéliser des gaz rares ou les liquides.

Le potentiel de Lennard-Jones prend une forme puissance dont un cas particulier est appelé potentiel de Lennard-Jones 6-12 :

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (139)$$

Le terme en r^6 représente la dispersion attractive de London entre deux particules (ou interactions de van der Waals), le terme en r^{12} représente la répulsion due au principe d'exclusion de Pauli. ε est l'énergie d'interaction (profondeur du puits) et σ la distance d'équilibre entre atomes.

Il existe d'autres formes de potentiels de paires, il s'agit des potentiels :

- de Born Mayer [Born32] : souvent utilisé pour décrire les systèmes ioniques, il se décompose essentiellement en un terme répulsif à courte distance.
- de Morse [Morse29], qui décrit les liaisons intermétalliques. Il se compose de deux termes à décroissances exponentielles, qui représentent l'équilibre entre la répulsion à petite distance et l'attraction au-delà de la distance d'équilibre diatomique.
- de Buckingham [Buckingham38] qui est intermédiaire entre les potentiels de Morse et de Lennard-Jones, à savoir qu'il possède un terme de répulsion de forme exponentielle et un terme d'attraction de forme puissance. Les potentiels répulsifs à forme exponentielle sont dangereux car ils présentent un maximum qui pour une distance plus courte donnent une force attractive non physique

En fait les potentiels de paires ne sont pas adaptés pour traiter le cas des métaux pour les raisons suivantes :

- Avec un potentiel de paires, on trouve que l'énergie de formation de la lacune est du même ordre que l'énergie de cohésion du cristal, alors qu'expérimentalement il existe un facteur 4.
- Pour un métal cubique, ils ne respectent pas la relation de Cauchy entre les deux constantes élastiques du matériau $C_{44} = C_{12}$. Dans le cas du fer on a $C_{44} / C_{12} = 0.883$.
- La température de fusion déterminée par un potentiel de paires plus grande que celle trouvée expérimentalement [Legrand 93]

Pour corriger les défauts inhérents aux potentiels de paires il faut prendre en compte la nature multi-corps des interactions de la liaison métallique et plus particulièrement pour les métaux de transition [Rosato 86].

3.2 Les potentiels à trois corps

Les potentiels à deux corps se révèlent incapables de modéliser tous les types de structures cristallines et notamment les structures covalentes, car ils ne prennent en compte ni la directivité de la liaison chimique, ni sa nature. Pour cette raison, des potentiels à trois corps ont été développés. Ils ont été développés pour simuler convenablement les propriétés des semi conducteurs tétraédriques. Les potentiels les plus connus sont ceux de Stillinger-Weber [Stillinger85] ou de Tersoff [Tersoff88].

Si ces potentiels sont particulièrement adaptés à la simulation des structures à liaisons covalentes, ils ne sont pas utilisés pour décrire les métaux.

3.3 Les potentiels à N corps

Les potentiels à N corps ont été développés en particulier pour décrire les métaux de transition. Les métaux de transition sont caractérisés par une bande d partiellement remplie. Un grand nombre de propriétés du matériau dépend du taux de remplissage de cette bande [Friedel 69].

La représentation classique des potentiels à N corps est basée sur une approximation des liaisons fortes au second moment pour la partie attractive. En fait, l'énergie de cohésion d'un atome i est définie par la différence entre l'énergie de l'atome libre et l'énergie dans la structure cristalline, c'est-à-dire l'énergie de l'atome à l'intérieur d'un cristal et son énergie lorsqu'il est seul dans le vide. Cette énergie de cohésion peut s'écrire :

$$E_c^i = - (E_b^i + E_r^i) \quad (140)$$

où E_b et E_r sont respectivement l'énergie de bande de l'atome i et une énergie de répulsion. Le premier terme est un terme attractif. L'autre terme est purement répulsif [Harris 85] et représente un potentiel de paires pour la répulsion à courte distance des nuages électroniques des couches internes de chaque atome.

L'énergie de bande est directement proportionnelle aux énergies des niveaux de Fermi et à la racine carrée du second moment [Friedel69] [Ducastelle70]. L'énergie de bande est le terme à N corps de l'équation précédente. En effet, la force exercée par l'atome j sur l'atome i ne dépend pas seulement de la distance qui les sépare, mais aussi de l'environnement de chaque atome, c'est-à-dire des distances qui séparent les atomes à l'intérieur du volume de cut-off [Legrand93].

Pour un système à N corps, l'énergie potentielle totale d'un système s'écrit :

$$\begin{aligned}
 U &= \sum_i^N E_R^i + E_b^i \\
 \text{où } \left\{ \begin{aligned} E_R^i &= \sum_{i \neq j} V(r_{ij}) \\ E_b^i &= -g(\rho_i) \text{ avec } \rho_i = \sum_{i \neq j} \phi(r_{ij}) \end{aligned} \right. \quad (141)
 \end{aligned}$$

Dans cette formulation d'un potentiel pour N corps, la partie répulsive reste un potentiel de paire, tandis que la partie attractive prend en compte la présence de l'ensemble des voisins. V et ϕ sont des fonctions de paires. Par contre g ne peut pas être décomposé en des fonctions de paires. Des formulations différentes pour g ont été proposées, mais la plus courante est une fonction racine carrée. Deux grandes tendances s'opposent sur les formes à donner à V et ϕ

A. Approximation du second moment des liaisons fortes (TB-SMA)

Ces potentiels sont directement issus de « l'école Ducastelle » [Ducastelle70] [Ducastelle72] [Ducastelle91]:

L'approximation du second moment est issue du développement de la théorie des liaisons fortes. Le terme d'attraction caractérisé par ϕ décroît exponentiellement avec la distance, et le terme répulsif est de type Born Mayer.

Les propriétés de volume et de surface ont été simulées avec succès par Rosato [Rosato 89a] pour des structures CFC. Dans cette approche, les seconds voisins sont traités de façons identiques aux premiers voisins :

$$\begin{aligned}
 E_{tot}^i &= E_R^i + E_b^i \\
 &= A \sum_{i \neq j} \exp(-pr_{ij}) - \sqrt{\xi^2 \sum_{i \neq j} \exp(-2qr_{ij})} \quad (142)
 \end{aligned}$$

Le premier terme est un potentiel répulsif de Born-Mayer. Le second terme est une énergie de bande attractive. Les paramètres p et q décrivent la dépendance en distance des intégrales de saut effectives.

Ce modèle a permis de retrouver la variation parabolique de l'énergie de cohésion et du module de cisaillement [Ducastelle70], en fonction du remplissage de la bande d pour les trois séries des métaux de transition [Rosato89a].

B. Les potentiels de type Finnis Sinclair [Finnis84]

Les potentiels de Finnis Sinclair ont été largement utilisées en dynamique moléculaire pour les éléments de transition. Dans l'approche Finnis-Sinclair (FS), V et ϕ sont choisis de manière empirique. FS proposent les formes de V et ϕ suivantes pour des métaux CC :

$$V(r) = \begin{cases} (r-c)^2(c_0 + c_1 r + c_2 r^2) & r \leq c \\ 0 & r > c \end{cases} \quad (143)$$

$$\phi(r) = (r-d)^2 + \frac{b(r-d)^3}{3}$$

Cette paramétrisation est adoptée pour le fer et le chrome. Pour les autres métaux CC il faut prendre $b=0$.

C. Le potentiel de Sutton-Chen

Développé par Sutton et Chen [Sutton90], ce potentiel est une forme d'interaction à longue distance du potentiel de Finnis Sinclair. L'énergie par atome dans un système à N atomes est donnée par :

$$U = D \left[\frac{1}{2} \sum_{j=1 \neq i}^N V(r_{ij}) - C \sqrt{\phi_i} \right] \quad (144)$$

Le premier terme est un potentiel de paire répulsif entre les atomes i et j séparés par une distance r_{ij} :

$$V(r_{ij}) = \left(\frac{\alpha}{r_{ij}} \right)^n \quad (145)$$

Et le deuxième terme représente la densité locale pour la cohésion de l'atome i :

$$\phi_i = \sum_{j=1 \neq i}^N \left(\frac{\alpha}{r_{ij}} \right)^m \quad (146)$$

Dans les expressions précédentes, α est un paramètre de longueur représentant la taille du réseau cristallin, C est un nombre sans dimension prenant en compte les effets d'attraction, D est un paramètre d'énergie, enfin n et m sont deux entiers positifs satisfaisant la relation $n > m$.

La forme fonctionnelle du potentiel de Sutton-Chen est assez simple par rapport aux autres formes de potentiel EAM ; d'un autre côté, elle est plus adaptée aux systèmes où les interactions sont de longue portée. Cette dernière propriété rend ce modèle particulièrement attractif pour étudier notamment les surfaces et les interfaces, puisque les surfaces font intervenir des interactions à longues distances.

D. Méthode de l'atome encapsulé (EAM embedded atom method)

La méthode EAM [Daw83] consiste à décomposer l'énergie totale d'un métal en un terme répulsif de paires et un terme attractif représenté par une fonction de présence dépendant de la densité de charges induites par les voisins. Elle est basée sur le fait que l'énergie d'un solide est fonction de la distribution de densité électronique. Ainsi on peut écrire :

$$\begin{cases} E_{tot}^i = \sum_i \beta_i \\ \beta = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(r_{ij}) - g(\rho_i) \text{ avec } \rho_i = \sum_{i \neq j} \phi(r_{ij}) \end{cases} \quad (147)$$

A partir de ce type de potentiel, si on pose comme précédemment que le premier terme est de type Born Mayer et que le second s'écrit $\xi^2 \sum_{i \neq j} \exp(-2qr_{ij})$ alors on retrouve un potentiel de TB-SMA. Et lorsque $g(\rho_{=i}) \propto \sqrt{\rho}$ avec $\rho_{=i} = \sum \frac{a}{r_{ij}}$, on trouve un potentiel de Finnis-Sinclair ou de Sutton Chen. Ce type de potentiel a été utilisé pour déterminer les propriétés de surface des matériaux.

3.4 Discussion :

Les potentiels de type Finnis Sinclair (où de type Sutton Chen [Sutton90]) souvent utilisés dans la littérature pour l'étude des métaux CC ne sont pas exempts de limitations. En effet, les premiers essais réalisés avec ces potentiels sur du fer CC ont montré des températures de fusion très éloignées (plusieurs centaines de degrés inférieures aux valeurs expérimentales). Dans le cas d'une étude sur la fissuration à chaud des aciers cet écart s'avère problématique.

Des simulations préliminaires avec différents potentiels nous ont montré leurs limites de prédiction des propriétés physiques (stabilité de la phase cristalline, paramètre de maille, coefficient de dilatation, température de fusion...). Le modèle le plus réaliste est celui proposé par Rosato [Rosato89a, 89b], issu de l'école Ducastel, mais nous avons vérifié l'analyse de Kojima [Kojima04]. Il a montré que les paramètres initiaux conduisaient à une température de fusion inférieure à 1665 K alors que le point de fusion théorique du fer gamma se situe à 1793 K [Kojima04] (la valeur pour le fer delta étant 1811 K).

Le potentiel choisi est donc un potentiel de type TB-SMA dont les paramètres sont donnés par [Kojima 04]. Kojima a conservé la forme du potentiel de Rosato et adapté les valeurs des paramètres. Ces paramètres sont résumés dans le tableau ci-dessous :

A	ζ	ρ	q
0,11313 eV	1,5534 eV	11,948	2,7654

Tableau 9 : paramètres du potentiel de Rosato [Kojima 04].

4. L'application d'un potentiel à N corps au Fer CFC.

4.1 Validation du potentiel et du jeu de paramètres

A. Description du système d'étude

Les simulations de dynamique moléculaire ont d'abord été réalisées sur un réseau composé de 9408 atomes de fer en structure CFC avec, pour le valider, des conditions triplement périodiques. Nous cherchons l'ensemble des données thermophysiques (type et paramètres de maille, coefficients de dilatation thermique, température et enthalpie de fusion...) sur une plage de températures comprises entre 1200 K et la température de fusion, et ce pour un ensemble NPT. Même si pour du fer pur la structure gamma n'est présente qu'entre 1223 K et 1665K sous une atmosphère, nous avons délibérément choisi de dépasser la borne supérieure de cet intervalle pour aller jusqu'à la température de fusion. En effet la température de fusion représente un indice important de fiabilité du potentiel choisi.

B. Paramètres de maille, masse volumique et coefficients de dilatation

Le paramètre de maille a été calculé entre 1223 K et 1665 K sous une atmosphère pour un ensemble thermodynamique NPT. La Figure 147 présente les résultats obtenus par simulation. Ceux-ci sont comparés avec un ensemble de données expérimentales issues de la littérature. L'écart relatif entre les données de la littérature et les résultats trouvés numériquement est faible (moins de 1%).

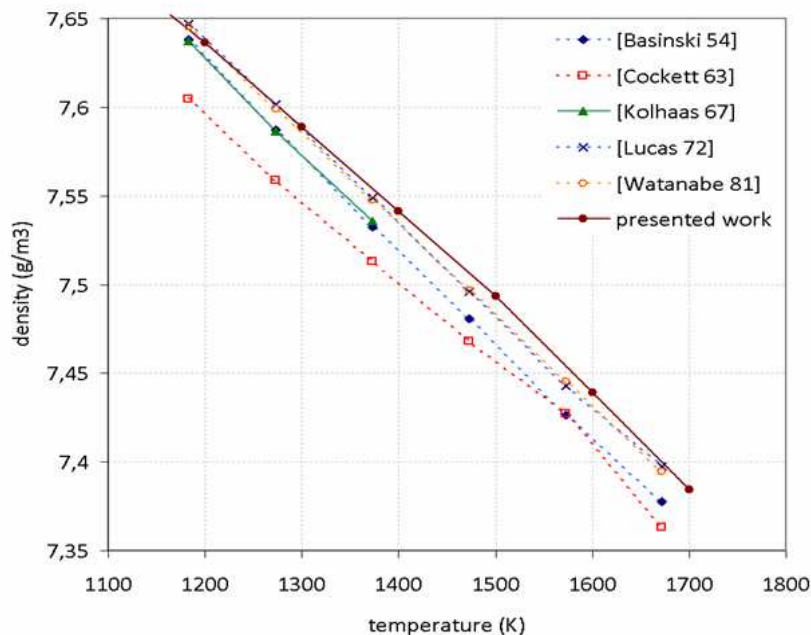


Figure 147 : Comparaison des densités du fer gamma pour des calculs DM avec des données expérimentales issues de la littérature

Le coefficient de dilatation de la maille cristalline du fer gamma déterminé numériquement est de $22,27 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$. Le coefficient de dilatation est proche des valeurs trouvées expérimentalement. Celles-ci, selon les sources, varient entre $22 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ [Babyuk 74] et $22,5 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ [Cockett63].

Travail actuel	[Watanabe81]	[Drotning 81]	[Saito69]
6,619	6.778	6,830	6,786

**Tableau 10 : masse volumique (g/cm^3) du fer à l'état fondu (température= 1850 K).
Comparaison entre les résultats DM et les données de la littérature.**

A l'état liquide, nous avons pu comparer la densité du fer avec les valeurs issues de la littérature, à 1850K (1577°C). Là encore nous observons que le potentiel choisi reproduit assez fidèlement le fer à l'état liquide.

C. Chaleur spécifique à pression constante

La chaleur spécifique à pression constante est obtenue en dérivant l'enthalpie par rapport à la température. Les calculs réalisés dans le paragraphe précédent nous donnent accès directement à l'énergie du système et donc à l'enthalpie, et ce en fonction de la température.

La Figure 148, compare la prédiction du modèle avec les données expérimentales de capacité calorifique à pression constante. On peut noter que d'une part les résultats numériques et les données sont proches, et d'autre part que leur croissance est quasiment linéaire entre 1200 K et 1700 K.

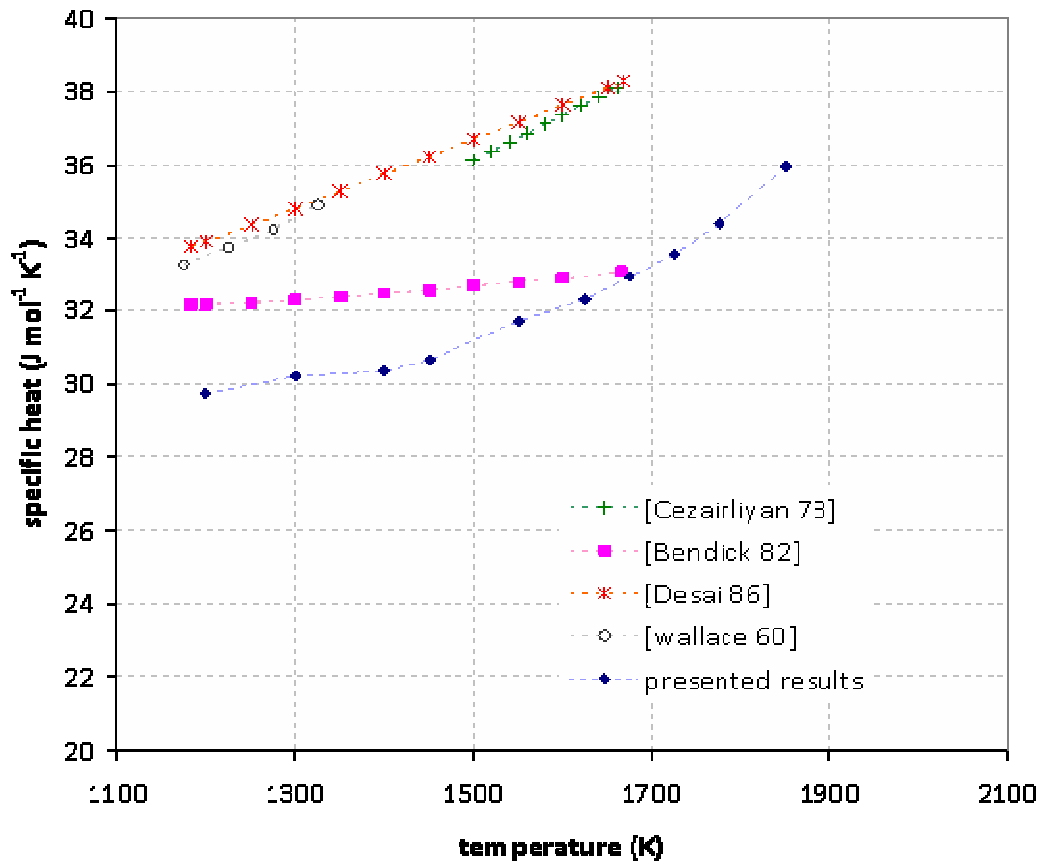


Figure 148 : Comparaison résultats DM (presented results)/données littérature de la capacité calorifique à pression constante du fer gamma

D. Fusion du fer

Il est connu qu'il faut prendre des précautions particulières en dynamique moléculaire pour pouvoir comparer la température de fusion prédite et la valeur expérimentale.

- D'une part, expérimentalement, la température de fusion est définie pour un cristal de grandes dimensions d'autre part on sait que la fusion débute par une surface et qu'elle se propage dans le cristal. En dynamique moléculaire, si des conditions triplement périodiques sont appliquées ; sur un cristal parfait, il n'y a pas de surface. Avec de telles conditions, faire fondre le cristal de fer équivaldrait à faire fondre un morceau de fer infini, ce qui n'est pas réaliste et qui tend à sur-estimer la véritable température de fusion.
- Pour éviter le problème précédent, les simulations peuvent être menées avec une surface libre, et dans un tel cas nous nous approchons d'un modèle de film mince. La Figure 149 montre la cellule unitaire dans le cas d'un modèle de surface et dans le cas d'un modèle de « bulk » (volume). La boîte de

simulation dans le cas du « bulk » a la forme d'un bloc parallélépipédique de dimensions ($3,5\text{nm} \times 3,5\text{nm} \times 8,7\text{nm}$) contenant 9408 atomes de fer. Pour réaliser un modèle avec surface libre avec un plan (111), il a été ajouté à chaque extrémité du cristal une région de vide. Cette région doit avoir des dimensions supérieures au rayon de coupure appliqué au champ de force pour éviter que les atomes de part et d'autre de ce vide puissent interagir. Par conséquent ce dernier modèle équivaut à prendre en compte un film d'épaisseur $8,7\text{nm}$ ayant deux surfaces libres. Dans un tel cas, la température de fusion sera sous estimée du fait de la dépression du point de fusion par la faible épaisseur de cristal (théorie de Gibbs Thomson [Sun07]). Ainsi la fusion de surface intervient pour des températures inférieures à la température de fusion de « bulk » [Van der Veen99].

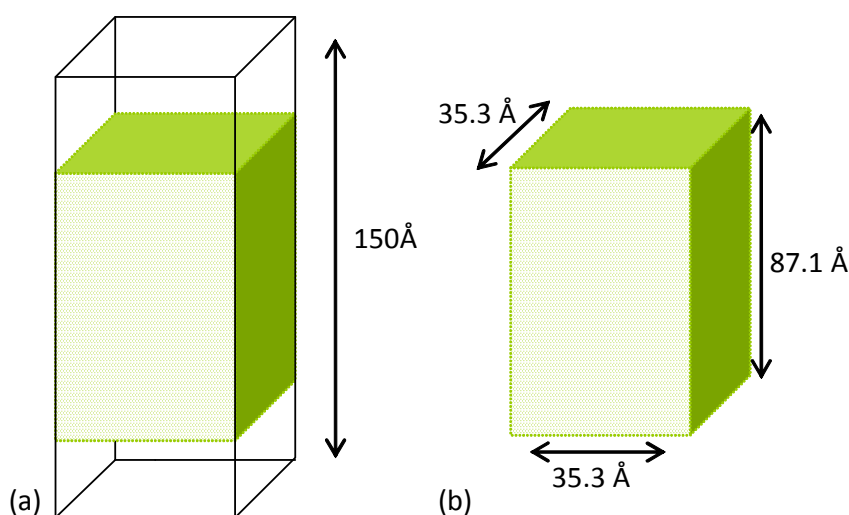


Figure 149 : cellule unité pour un modèle de surface (a) et un modèle de « bulk »(b)

a) Fusion de surface :

Il est connu que la fusion d'un cristal de taille finie est amorcée en surface du fait de la plus grande mobilité des atomes. Cet effet est classiquement attribué à la contribution de l'énergie de surface dans le processus de fusion. Il est également connu que les différents plans cristallographiques n'ont pas la même stabilité et par conséquent, pas la même énergie de surface. Ainsi pour la phase gamma du fer, la fusion débute par le plan cristallographique {111} qui est un plan dense. C'est celui qui sert pour définir expérimentalement la température de fusion. C'est la raison pour laquelle nous avons simulé tous les systèmes cristallins comportant une surface, libre ou en contact avec du fer fondu, avec ce plan cristallographique (Figure 150).

Ce modèle de faible épaisseur ($87,1 \text{ Å}$) fond à basse température (1750 K). La surface libre du cristal est rapidement remplacée par une interface entre le cristal et le métal fondu (Figure 150, 5ps) qui se propage jusqu'à faire fondre totalement le cristal (Figure 150, 15 ps). Nous avons effectué ce type de simulation à différentes températures. La vitesse du front de

fusion dépend très fortement de la température. Le front de fusion, au premier ordre, semble être plan et progresser de part et d'autre du cristal à vitesse constante. La vitesse de propagation dépend fortement de la surfusion appliquée au cristal et de son épaisseur. En fait, la géométrie de l'interface cristal/fondu n'est pas plane. Elle présente une instabilité dont l'amplitude est directement contrôlée par l'énergie de surface entre le cristal et le fondu [Hoyt01].

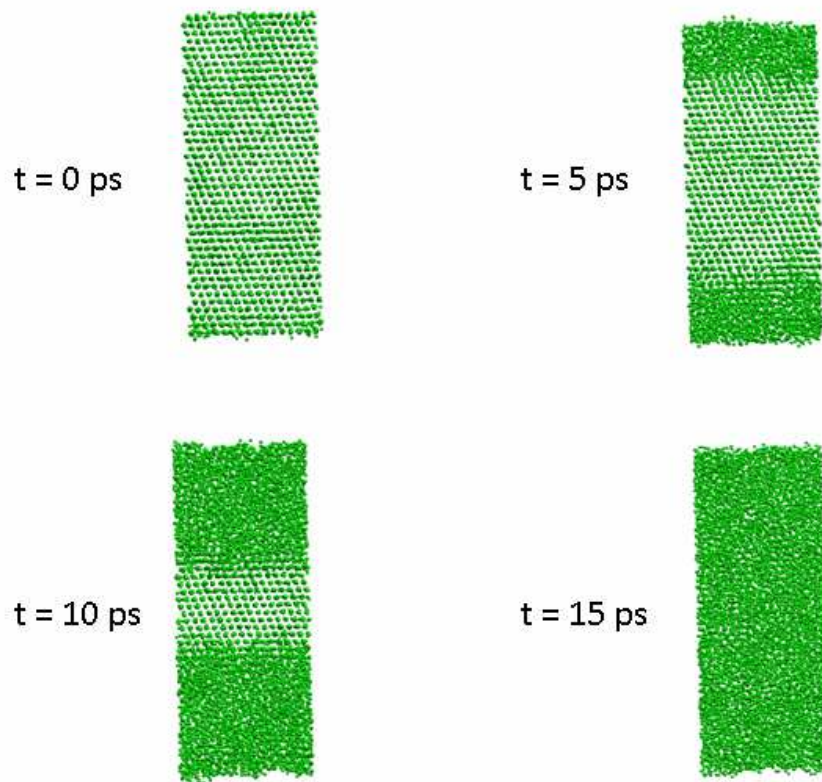


Figure 150 : fusion de surface d'un domaine cristallin élémentaire comportant 9408 atomes de fer. $T=1750K$

b) Fusion de bulk :

A la différence d'un modèle de surface où la zone liquide apparaît en surface et se propage vers le cœur du système, lors d'une fusion de bulk le germe liquide peut apparaître n'importe où. Pour décrire un tel phénomène, mais dans des conditions de pression proches de celles rencontrées dans le noyau terrestre, Alder [Alder63] utilise la loi de fusion de Linderman, qui postule que la fusion intervient dès lors que la moyenne quadratique de l'amplitude de vibration des atomes dépasse une fraction critique de la distance entre plus proches voisins. Dans ce cas, du fait de la plus faible liberté de mouvement des atomes de cœur par rapport aux atomes de surface, la température de fusion est bien plus élevée que dans le cas d'une fusion de surface. En effet, la moyenne quadratique de l'amplitude de vibration des atomes reste plus faible que pour des atomes de surface, et donc nécessite d'avoir une température plus élevée avant de dépasser la valeur critique.

Dans le cas présent, Figure 151, nous montrons une fusion de « bulk » pour une température de 2100K. Cette température a été choisie car pour des températures inférieures, aucune fusion n'apparaissait au temps de simulation qui a été utilisé. Ceci montre la forte thermo-dépendance de la probabilité d'atteindre la condition critique de déclenchement de la fusion. En effet comme discuté précédemment, celle-ci est directement reliée à la vibration des atomes. De plus, sur la Figure 151 (3.5ps), on remarque que plusieurs sites sont activés simultanément, ce qui montre l'existence d'un couplage à longue distance dans les vibrations atomiques. On remarque aussi qu'à l'inverse du cas de fusion de surface, le front de fusion n'a pas de direction de propagation privilégiée. En effet la fusion se produit très rapidement dans les différentes directions de l'espace.

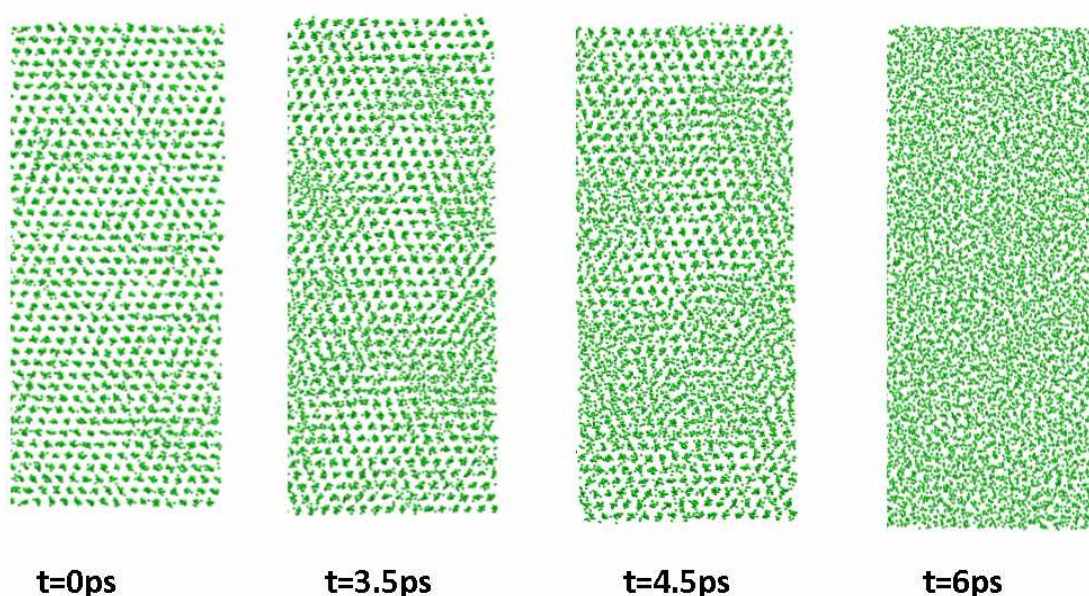


Figure 151 : fusion de bulk d'un domaine cristallin élémentaire comportant 9408 atomes de fer. $T=2100K$

c) fusion et température d'équilibre thermodynamique

La température de fusion, ou température d'équilibre thermodynamique, est définie comme étant la température d'équilibre entre un cristal de grandes dimensions en contact avec le même matériau à l'état fondu. Il faut donc créer une interface entre un cristal, face [111] et du fer fondu dense, sans surface libre. Ceci n'est pas difficile à réaliser, mais il faut que le cristal soit de grande taille. Les conditions classiques de périodicité appliquées en dynamique moléculaire ne sont pas compatibles avec cette hypothèse. Nous avons rendu le système semi-infini en fixant la position (ou en ralentissant la dynamique) d'un plan atomique éloigné de l'interface cristal/fondu. Puis nous avons étudié l'évolution de la vitesse du front de fusion en fonction de la température. Nous avons extrapolé cette évolution jusqu'à la température pour laquelle la vitesse est nulle. Par cette méthode comme le montre la Figure 152, on peut trouver la température d'équilibre thermodynamique du

modèle. Celle-ci s'établit dans le cas présent à 1710 K pour une température théorique de 1793K, ce qui représente une erreur d'environ 5%.

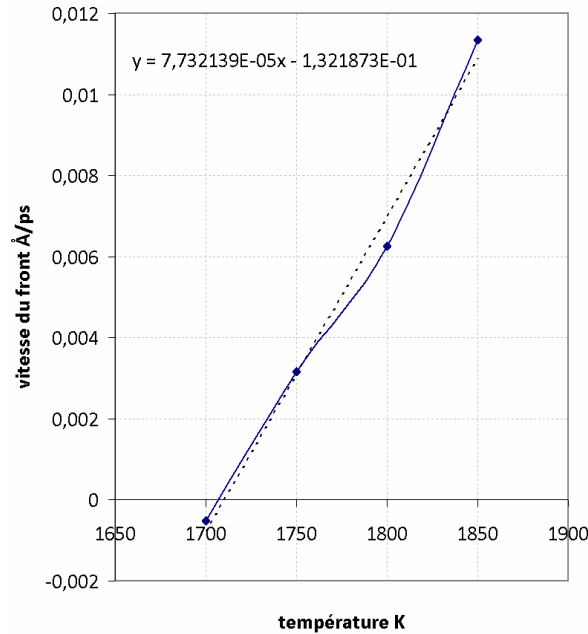


Figure 152 : analyse de la vitesse de propagation du front solide/liquide pour déterminer la température d'équilibre thermodynamique

d) Densité de distribution

Nous avons vu dans le cas d'une surface libre que la fusion progressive d'un cristal se traduit par une progression d'un front de fusion. Les simulations macroscopiques de solidification ou de fusion faisant intervenir une interface avec un modèle de type level-set élargissent artificiellement la largeur de l'interface solide/liquide. La modélisation moléculaire à l'échelle atomique permet d'analyser finement cette interface en utilisant la densité de distribution de présence des atomes dans un plan.

Cette progression correspond à une perte d'ordre local qui peut être analysée par la fonction de densité locale de présence des atomes à une position précise.

Nous pouvons définir la fonction densité locale le long d'une direction l comme :

$$\rho(l) = \frac{1}{A} \frac{dn(l)}{dl} \quad (148)$$

où $dn(l)$ est le nombre d'atomes compris entre les coordonnées l et $l+dl$, A l'aire de la surface perpendiculaire à la direction l . Il mesure en 1D l'écart quadratique par rapport à la position d'équilibre.

Dans l'absolu, pour un solide à 0K, cette fonction est constituée d'un ensemble de fonctions de Dirac représentant chaque plan atomique. Lorsque la température croît, les pics s'élargissent du fait de l'accroissement de l'amplitude des vibrations des atomes. Grâce

à ces profils de densité, il est possible de définir les positions des couches atomiques, leur extension et lors de transition d'étudier la transition.

Un plan atomique du cristal est facilement identifiable comme étant la région d'espace bornée par deux minima successifs de densité atomique. Dans le liquide, la densité prend une valeur moyenne sans organisation apparente.

Il est possible de trouver des changements structuraux près de la surface en fonction de l'augmentation de la température, ces changements structuraux étant dus à l'agitation thermique provoquée par la fusion de surface. Pour mettre en évidence ce phénomène, nous avons étudié les fonctions de densité locales en surface en fonction de la température.

La Figure 153 montre les trajectoires des atomes sur les couches surfaciques pour un modèle de fusion de surface. Ces figures sont obtenues lorsque le système est équilibré. La première représente les positions atomiques initiales. Sur ces figures on constate :

- Que pour chaque température, les vibrations atomiques sont plus importantes en surface que dans le cristal. L'épaisseur de la zone de forte vibration croît avec la température. On observe un élargissement du pic de corrélation, ainsi qu'une diminution du maximum. La Figure 153 quant à elle montre la distribution de la densité d'atomes équivalente à chaque image. Cette dernière a été calculée seulement sur la moitié supérieure du cristal. Chaque pic correspond à un plan cristallin. Plus la température est élevée, plus les pics près de la surface sont petits et étalés.
- Pour les températures les plus élevées, les couches superficielles font apparaître des adatoms (les adatoms sont des atomes qui vont migrer vers la surface d'un cristal ou d'un substrat). Ces derniers sont produits par la diffusion des couches de surface. Et par conséquent la structure devient plus désordonnée en surface pour les températures les plus élevées.

Ceci suggère qu'avec une élévation de la température, la surface devient désordonnée et l'épaisseur de cristal croît. Ce résultat confirme le processus de fusion par la surface. De plus, il précise le domaine d'épaisseur correspondant à l'interface de fusion, ou de cristallisation, car c'est le même. Cette fonction permet d'analyser préférentiellement l'ordre dans le cristal. Comme indiqué à la Figure 153, 6 à 8 plans atomiques constituent le domaine d'épaisseur de la zone de fusion. Cette analyse est mal adaptée à l'analyse correspondante de la zone fondue.

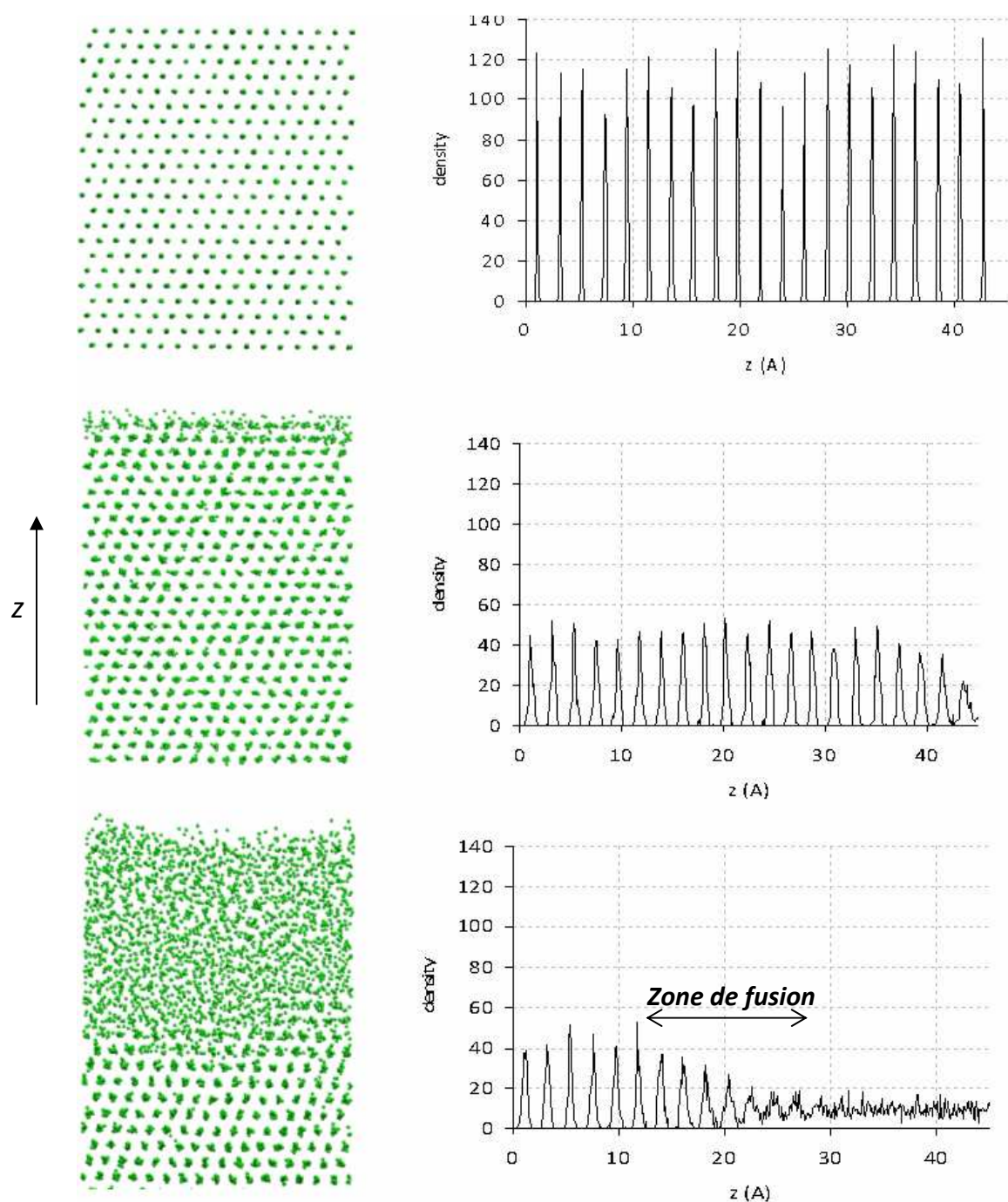


Figure 153 : à gauche : positions des atomes après équilibre du système (300K, 1700K et 1710K), à droite : distribution du nombre d'atomes pour un modèle de fusion de surface et pour différentes températures (temps de fin de simulation 50 ps).

De plus, on peut noter l'apparition d'un pic additionnel montrant la présence d'adatoms. En fait d'une part les atomes de surface peuvent bouger plus facilement que les autres et d'autre part, l'élévation de la température favorise ce mouvement. Par conséquent à suffisamment haute température, les atomes pouvant bouger plus facilement sur les

couches supérieures, ceux-ci peuvent devenir adatoms. Ces adatoms sont des atomes qui ont diffusé vers la surface, ce qui leur permet d'une part de trouver un site d'adsorption stable et d'autre part de se lier à d'autres adatoms. Cette phase participe à la formation d'une nouvelle couche atomique. C'est cette couche atomique qui est décrite par Desjonquères [Desjonquères 96] comme la formation d'îlots de matière en surface. Ce phénomène avait déjà été observé en dynamique moléculaire sur des surfaces d'aluminium [Shu99].

e) Fonction de corrélation

Pour définir l'ordre local dans l'état fondu il faut analyser la distribution de présence autour d'un atome donné pris au hasard. Cette analyse s'applique bien dans le cas d'un matériau homogène tel qu'un matériau fondu. Elle peut être appliquée également aux phases cristallines. La fonction de corrélation de paires peut être définie comme :

$$g(r) = \rho \frac{dN}{4\pi r^2 dr} \quad (149)$$

La fonction de corrélation de paire traduit la probabilité de trouver une particule à une distance r d'une particule de référence. dN est le nombre de particules dans une couronne sphérique comprise entre r et $r+dr$ et ρ la densité du système. On note d'une manière générale, qu'à courte distance, celle-ci décrit correctement le réseau cristallin ; à plus longue distance cette description est plus diffuse, et tend à devenir constante à longue distance. Deux exemples de fonction de distribution de paires sont donnés par les Figure 154 et Figure 155.

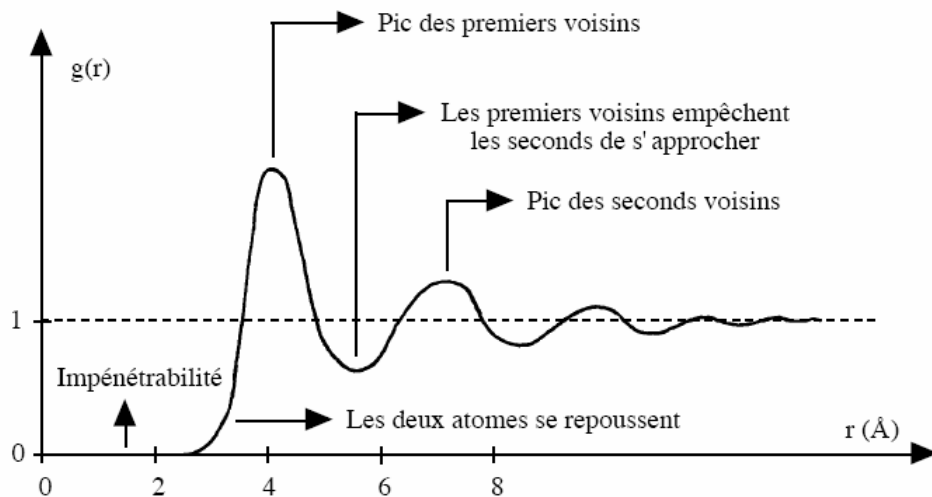


Figure 154 : liquide simple : il n'existe pas d'ordre à grande distance mais les premiers pics de la fonction de distribution révèlent un ordre à courte distance qui constitue la structure liquide. [Hayoun 08]

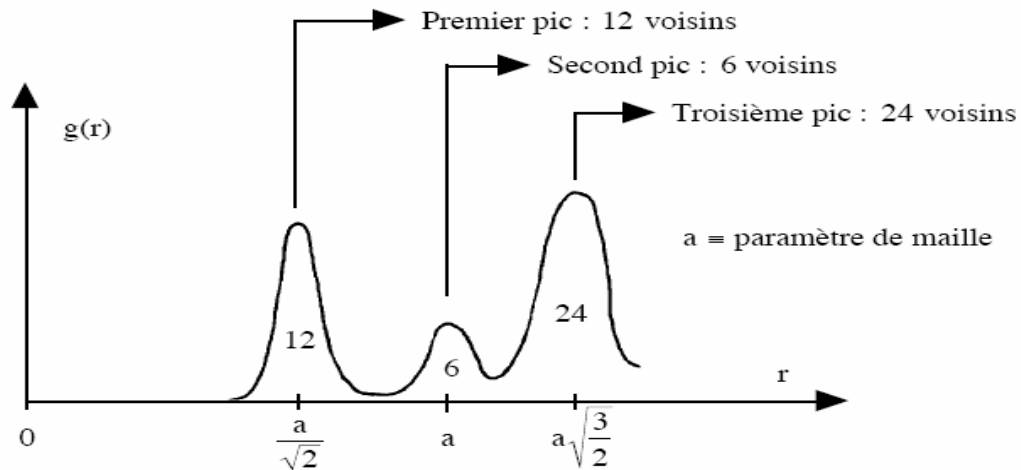


Figure 155 : solide cristallin cubique faces centrées : dans cette structure ordonnée à longue distance les pics successifs correspondent aux premiers, seconds, troisièmes voisins... . L'aire de chaque pic est proportionnelle au nombre de voisins. [Hayoun 08]

La Figure 156 présente la fonction de distribution de paires pour le réseau cristallin CFC et sa fusion. A l'état cristallin, on distingue clairement les positions des séries de plus proches voisins. De plus, l'élévation de la température provoque un élargissement des pics de corrélation et la disparition d'un pic secondaire caractéristique de positions précises dans le cristal. La fusion progressive des réseaux cristallins à 1710 K quant à elle se traduit par la disparition d'un ordre à grande distance. L'ordre local qu'il est possible d'observer, n'est rien d'autre que ce qui avait déjà été observé dans le paragraphe précédent. C'est-à-dire la transition sur seulement quelques couches donc quelques nm.

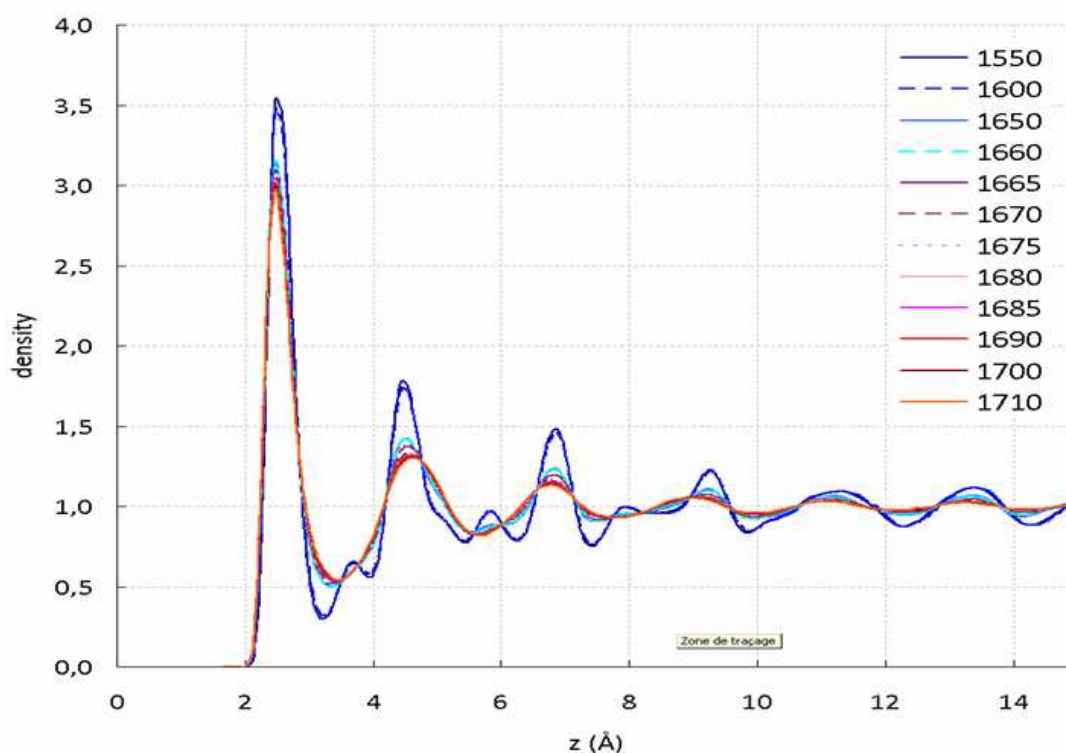


Figure 156 : distribution de la densité de présence

4.2 Caractéristiques à l'état liquide

A. Cavitation

Dans le chapitre 2, le modèle de fissuration à chaud RDG [Rappaz 99] a été présenté. Il se base sur le fait que les défauts de solidification sont la conséquence de l'apparition de cavités. Ces cavités résultent d'une mise en dépression de la zone liquide interdendritique. La mise en traction comme nous l'avons vu, peut avoir des origines diverses. Mais le fait est que ce modèle considère que l'apparition de cavités (celles-ci pouvant dégénérer en criques) se fait principalement à cause d'une mise sous contrainte et d'un défaut d'alimentation de la zone liquide située à l'extrémité de la zone de cohérence (cf Figure 157). Si la pression dans cette zone devient inférieure à une pression critique, alors une cavité apparaît.

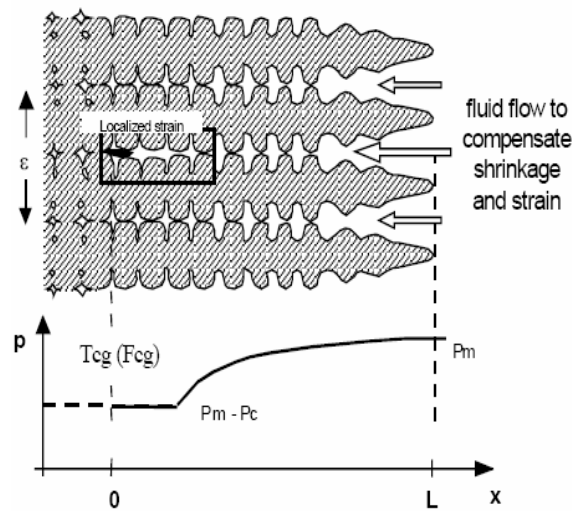


Figure 157 : représentation schématique montrant la localisation de la fissuration. Cette localisation est à mettre en parallèle avec la chute de pression dans cette zone interdendritique [Drezet 02]

Ce modèle repose sur des phénomènes qui sont très locaux, très difficilement quantifiables et observables (si ce n'est par des moyens tels que la tomographie X, mais cette technique est principalement utilisée sur des aluminiums). C'est pourquoi une étude par dynamique moléculaire peut s'avérer très judicieuse. En effet celle-ci devrait nous permettre d'une part de comprendre à l'échelle locale les raisons de l'apparition d'une cavité, sa localisation dans la zone fondue ou près d'une interface cristal/fondu, la cinétique de croissance de celle-ci, mais aussi de déterminer dans des cas parfaits, des ordres de

a) Rupture d'un liquide

Lorsqu'un liquide est placé dans un état de tension hydrostatique, c'est-à-dire lorsque sa pression interne devient négative, il devient instable. Lorsque cette dépression devient trop importante, apparaissent de multiples pores (on parle alors de cavitation). Le mode de cavitation dans les liquides diffère grandement du mode de fracture dans les solides. Dans un liquide, on définit une pression critique de cavitation à partir de laquelle un pore va apparaître et croître tandis que dans un solide, la cavitation requiert l'apparition et la coalescence de multiples cavités.

La formation d'une cavité de volume V requiert un travail pV , où p est la pression à l'intérieur du liquide (ce terme est négatif si la pression est négative) auquel s'ajoute le travail nécessaire à la formation d'une interface liquide/vapeur qui est égal à γS où γ est l'énergie de surface liquide/vapeur et S la surface de la cavité. Dans le cas où on néglige la pression de vapeur devant la pression dans le liquide, le travail total nécessaire à l'apparition d'une cavité sphérique peut s'écrire :

$$W = 4\pi r^2 \gamma + \frac{4}{3} \pi r^3 p \quad (150)$$

Le travail atteint un maximum $W^* = \frac{16\pi\gamma^3}{3p^2}$ pour un rayon critique (ou rayon d'équilibre),

la valeur de ce rayon est prédite par la loi de Laplace : $r_{crit} = -\frac{2\gamma}{p}$. La théorie de la nucléation

[Fisher 48] établit que la formation d'une bulle est proportionnelle à $\exp(W^*/kT)$. Le facteur de proportionnalité reliant la formation d'une bulle au terme précédent peut être estimé à partir de la théorie de la cinétique du germe activé. Il peut s'écrire :

$$\frac{Nk_bT}{h} \exp\left(-\frac{\Delta f}{k_bT}\right) \quad (151)$$

où h est constante de Planck, et Δf est l'énergie libre d'activation du mouvement des particules. La vitesse d'apparition d'une bulle de vapeur dans une mole de liquide lorsque ce dernier est sujet à une pression négative:

$$\frac{dn}{dt} = \frac{Nk_bT}{h} \exp\left(-\frac{\Delta f + W^*}{k_bT}\right) \quad (152)$$

A partir de l'équation précédente il est assez facile de déduire une pression de rupture du film liquide. La pression critique de cavitation dans un liquide a été définie par [Fisher 48] et peut s'exprimer comme suit :

$$P_c = -\left[\frac{16\pi}{3k_bT} \frac{\gamma^3}{\ln(Nk_bT/h)}\right]^{1/2} \quad (153)$$

Les valeurs des pressions de cavitation définies par [Campbell 68] et [Fisher 48] sont résumées dans le Tableau 11. Il présente une comparaison entre des valeurs théoriques issues des équations précédentes et des essais expérimentaux.

liquide	Energie de surface (mN/m)	Température (K)	Pc Valeur théorique (atm) Equation (153)	Pc Expérimentale (atm)
Eau	72	300	-1380	-270
Mercure	490	300	-23100	-425
Aluminium	850	933	-30500	-
Cuivre	1300	1356	-48000	-
Fer	1850	1800	-70800	-

Tableau 11 : comparaison des pressions critiques définies à partir de l'énergie de surface avec les valeurs expérimentales pour différents liquides [Campbell 68] et [Fisher 48]

Les valeurs théoriques surestiment fortement les valeurs expérimentales de cavitation, ce qui tend à signifier que d'autres phénomènes entrent en jeu.

- Il est possible que dans la condition expérimentale de pression, l'énergie de surface γ soit plus faible que celle déduite de mesures à l'équilibre sur des bulles de grande taille (de quelques microns à quelques mm) pour lesquelles la pression hydrostatique est faible. Dans cette hypothèse, le modèle devrait surestimer la pression car il utilise des énergies de surface d'équilibre. Les énergies de surface réelles devraient alors être plus faibles d'un facteur 3 (eau) à 14 (mercure).
- On peut aussi envisager que la composition de la surface soit assez différente de la composition nominale. On peut ainsi envisager les gaz piégés à l'intérieur du liquide ou encore la présence de fines inclusions. En effet la surface liquide étant de composition hétérogène, la valeur de l'énergie de surface est modifiée, classiquement ceci se traduit par une décroissance de cette valeur.

b) Simulation de la cavitation d'un liquide

Ces simulations DM ont été réalisées sur un élément composé de 9408 atomes de fer à l'état liquide. L'état liquide a été obtenu après avoir chauffé un système cristallin ayant une surface libre au delà de la température de fusion. Une fois équilibré, le volume de la boîte de simulation a été augmenté par paliers de déformation uniaxiale pour provoquer une dépression jusqu'à l'apparition d'une cavité. Pour cela nous nous sommes placés dans un ensemble NVT. La Figure 158 permet d'observer les différents paliers correspondant, pour chacun d'eux, à une condition d'équilibre. Lorsque la pression critique est atteinte (point bas situé à 200ps), la cavité qui apparaît voit sa taille croître très rapidement et ainsi la pression décroît pour atteindre une condition d'équilibre décrite par l'équation de Laplace. La taille de la cavité et la pression restent constantes au cours du temps. Ces conditions sont imposées par la taille de la boîte maintenue constante. L'équation de Laplace permet de déduire l'énergie de surface de la mesure du rayon de la bulle et de la pression prédite.

La pression de cavitation trouvée numériquement est de l'ordre de 50 kbars, soit du même ordre de grandeur que la pression théorique décrite précédemment dans le Tableau 11 (70,8 kbars).

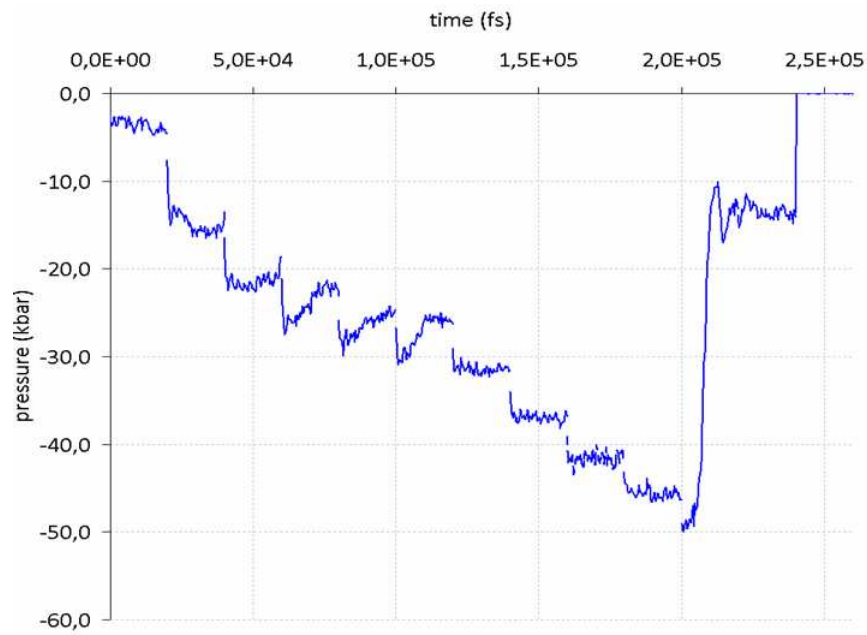


Figure 158 : évolution de la pression à l'intérieur du fer fondu. Cette pression décroît jusqu'à ce qu'apparaisse une cavité.

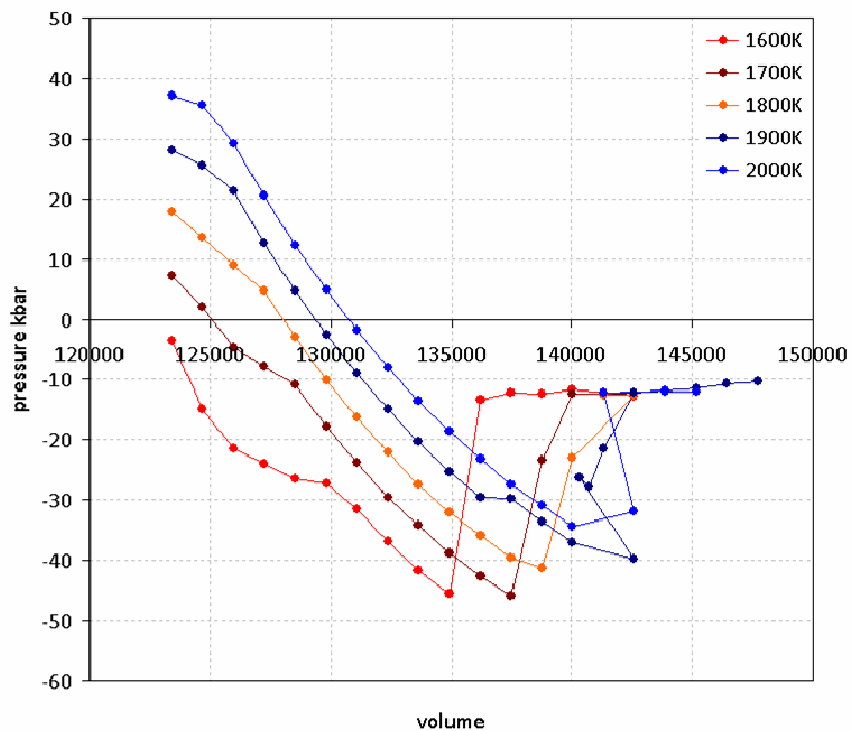


Figure 159 : évolution de la pression de cavitation à l'état liquide en fonction de la température

Pour analyser le rôle de la température sur le phénomène de cavitation, nous avons répété les mêmes simulations à différentes températures (Figure 159). Il apparaît que plus la température est basse, plus il faut une grande dépression pour que la cavitation s'amorce. Cela signifie qu'une zone fondue interdendritique piégée à basse température aura plus de difficulté à caviter que la même zone située à plus haute température. Ceci devrait impliquer que les zones de peau (froides) devraient caviter moins facilement qu'une zone de cœur.

B. Energie de surface

Comme nous l'avons vu en introduction, la cavitation et par conséquent la fissuration à chaud dépendent fortement de la tension de surface et de l'angle de mouillage. S'il est facile de mesurer des tensions de surface à température ambiante, réaliser de telles mesures s'avère plus complexe dans le cas de l'acier, en particulier pour des températures supérieures à 1700 K. Par conséquent, la détermination de l'énergie de surface par méthode de dynamique moléculaire peut s'avérer très intéressante. Pour cela, à partir du dernier calcul de cavitation sur un barreau liquide de 9408 atomes, nous avons pu prédire l'énergie de surface en fonction de la température à l'état fondu.

a) Méthodologie :

En considérant les volumes de la boîte de simulation après et avant cavitation (pour une pression identique), nous pouvons en déduire le volume de la bulle. En considérant ce volume et en utilisant la loi de Laplace, on a :

$$P_2 - P_1 = \gamma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (154)$$

Dans le cas d'une goutte sphérique de rayon R, la tension de surface s'écrit donc :

$$\gamma = \frac{RP}{2} \quad (155)$$

où P est la pression.

Il faut connaître le rayon de la bulle à la pression prédite. Nous avons d'abord vérifié par visualisation des cavités au cours du temps aux différentes températures que celles-ci sont bien sphériques. Nous avons alors déterminé leur taille en tenant compte du coefficient de compressibilité déduit des simulations menées aux mêmes températures au cours de la dépression avant cavitation (Figure 159). Cette correction est cruciale dans la détermination de la taille de la cavité et par conséquent de l'énergie de surface.

b) Résultats :

Le modèle prédit une énergie de surface pour de l'acier liquide à 1600K (en surfusion) de 0,96 N/m pour une pression de 4,5 kbars. Cette valeur est à comparer à la valeur théorique de 1,854N/m, à cette même température. Nous avons volontairement augmenté le volume du système, provoquant une faible augmentation de la taille de la cavité et une diminution de la pression. En appliquant les mêmes traitements des données sur ces différentes dimensions de cavité, nous avons pu déterminer son influence sur l'énergie de

surface (Figure 160). Le but est de définir la précision de la détermination de l'énergie de surface et si elle dépend de la taille de la cavité, dans le domaine de taille exploré.

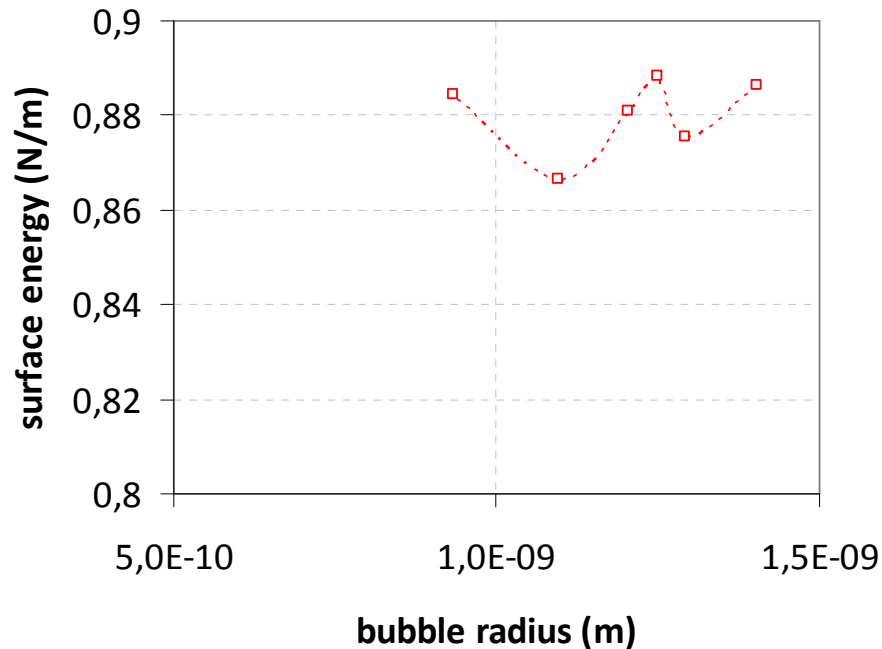


Figure 160 : effet de la taille de la bulle sur l'énergie de surface

On note que l'énergie de surface ne dépend quasiment pas du diamètre de la bulle dans le domaine restreint de taille que nous autorise la simulation numérique. La taille du domaine et la dépression limitent l'analyse à la nucléation et aux premiers stades de la croissance de la bulle. Ce sont des domaines de taille inaccessibles expérimentalement. Cependant nous retrouvons que l'énergie de surface est certainement plus faible aux premiers stades de la croissance de la cavité, sous forte dépression, que celle issue de mesures sous faible dépression. Nous pensons que cette énergie de surface doit être plus faible sous forte dépression car elle correspond à une plus faible densité et une plus grande mobilité des atomes dans le volume et par conséquent pour le renouvellement des atomes situés à un instant donné à la surface de la cavité. Dans cette analyse la détermination du coefficient de diffusion est essentielle. Celle-ci est déduite directement des simulations qui analysent l'écart quadratique moyen de la position de tous les atomes par rapport à leur position initiale au cours du temps (théorie du mouvement brownien d'Einstein).

C. Viscosité liquide :

Les résultats de simulation, pour différentes pressions nous permettent de trouver la viscosité dynamique du fer à l'état fluide. A partir de l'équation de Stokes-Einstein [Einstein 05] qui relie la viscosité dynamique au coefficient d'auto diffusion D , cette équation peut s'écrire :

$$\mu = \frac{kT}{6\pi rD} \quad (156)$$

a) Méthodologie

L'évolution de la viscosité d'un liquide évolue d'une part en fonction de la température et d'autre part en fonction de la pression exercée sur le système. Pour cela nous avons réalisé différentes simulations, pour différentes températures et différentes pressions.

Nous avons déterminé le coefficient de diffusion du fer fondu tous les 100K entre 1600K et 2000K température et en dépression avant qu'apparaisse la cavitation. Cette connaissance permet d'en déduire directement la viscosité ainsi que sa thermodépendance et sa piezodépendance en milieu homogène et dense. En effet, nous avons fait varier la température de 1600K à 2000K, pour des sollicitations en traction (dépression dans le système) ou en compression (surpression).

b) Evolution du coefficient de diffusion

Comme nous l'avons vu précédemment l'équation de Stokes-Einstein fait intervenir le coefficient de diffusion. [Iida 88] avance des données expérimentales, à pression atmosphérique, comprises entre 4.16×10^{-9} et $4.91 \times 10^{-9} m^2/s$, pour des températures comprises entre 1833K et 1900K.

Par simulation dynamique moléculaire, nous nous sommes intéressés à l'évolution du coefficient de diffusion en fonction de la température et à pression nulle. Le coefficient de diffusion est calculé à partir de la fonction d'autocorrélation de la vitesse. C'est alors la formule de Green-Kubo qui est employé :

$$D = \frac{1}{3} \int_0^\infty \langle v(t_0 + t) \cdot v(t_0) \rangle dt \quad (157)$$

où t_0 représente une origine des temps.

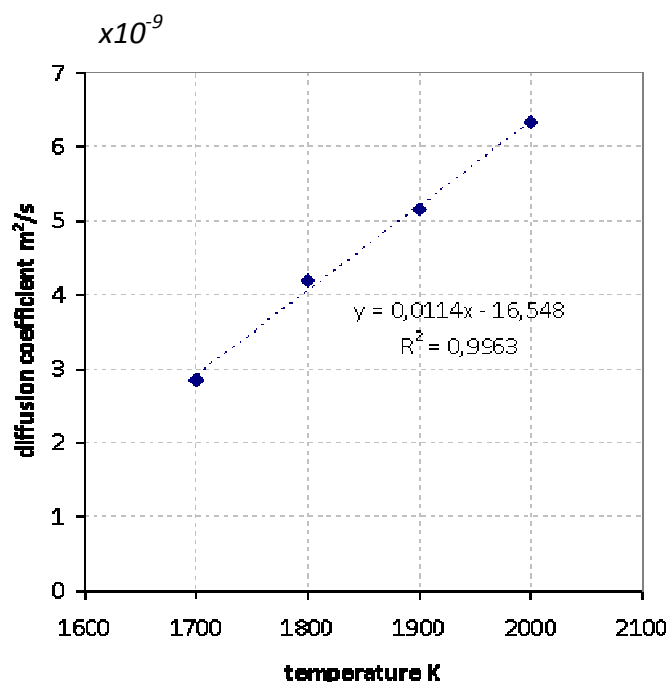


Figure 161 : l'évolution du coefficient de diffusion en fonction de la température et à pression nulle

Le coefficient de diffusion change linéairement en fonction de la température (Figure 161). De plus les valeurs trouvées par dynamique moléculaire sont très proches de celles trouvées expérimentalement. Par conséquent déduire des valeurs de viscosité à partir de valeurs de coefficients de diffusion trouvés numériquement semble raisonnable. Cette viscosité sert à alimenter la veine liquide et à équilibrer la pression dans la zone en dépression.

c) Influence de la pression sur la viscosité

Dans ce paragraphe, nous nous intéressons à l'influence de la pression sur la viscosité. Comme nous l'avons mentionné précédemment le système a subi des sollicitations allant de la traction à la compression.

D'une manière générale, la viscosité décroît avec la mise en dépression du système. Ce qui s'explique très bien par le changement d'ordre local en fonction de la mise en dépression comme le montre la figure ci dessous.

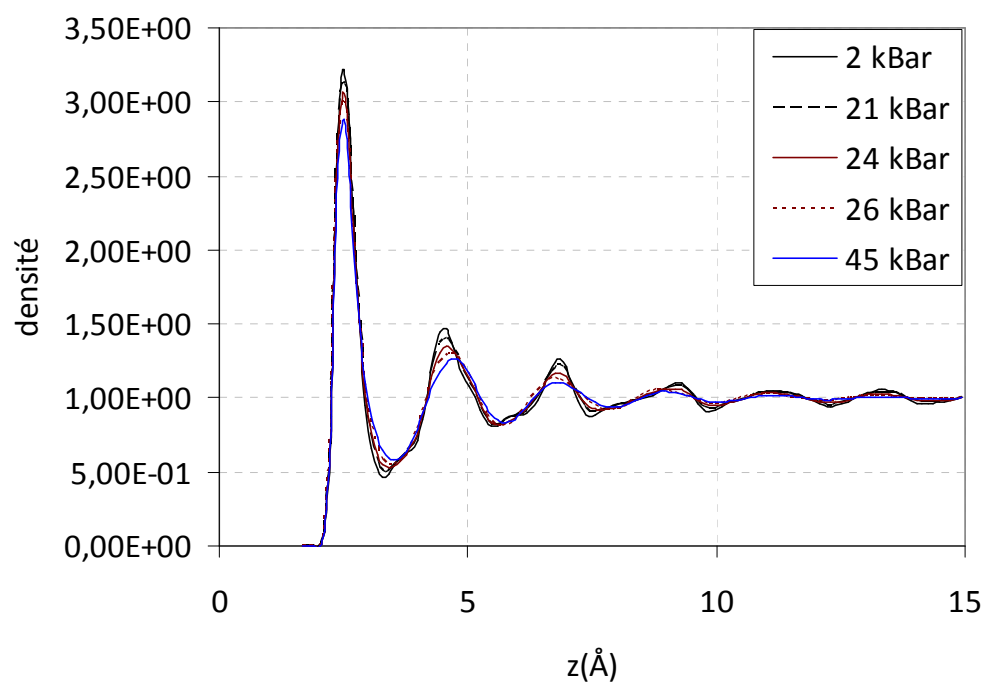


Figure 162 : l'évolution de la fonction de distribution à 1600K pour différentes valeurs de pression.

En effet l'équation décrit très bien ce phénomène. Car plus la dépression est forte, plus la diffusion est importante, et par conséquent plus la viscosité est faible.

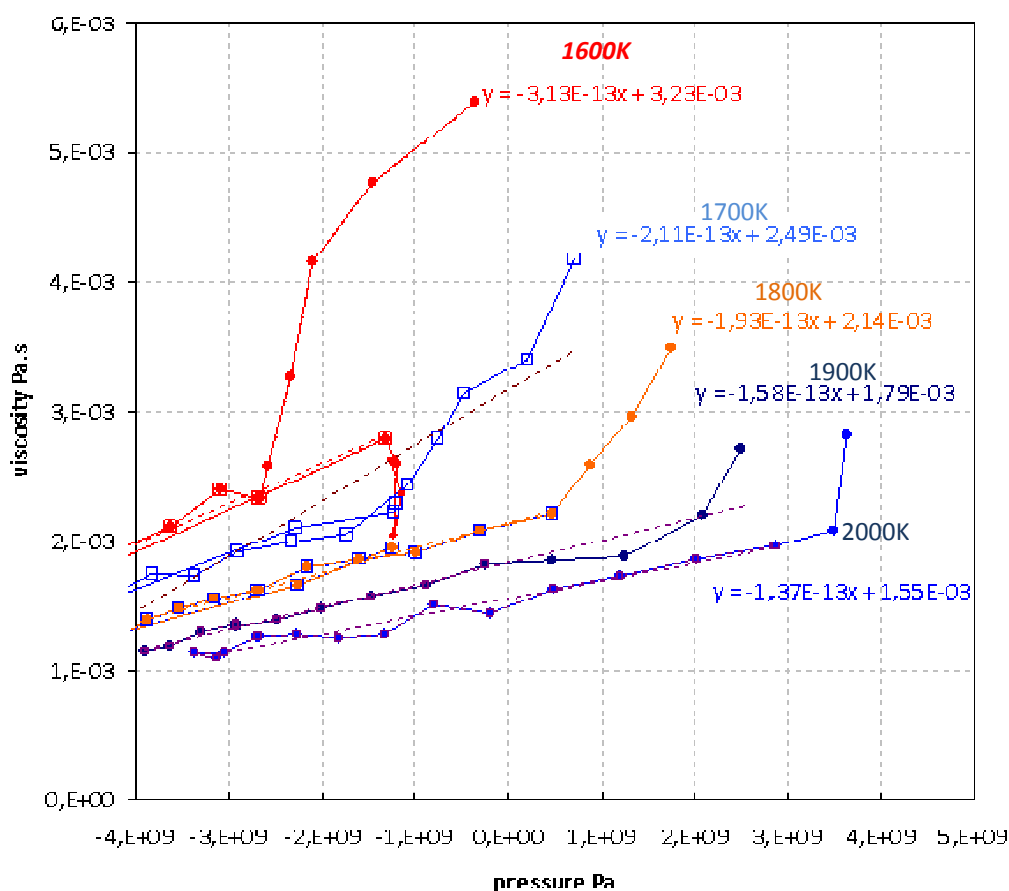


Figure 163 : variation de la viscosité en fonction de la pression pour différentes températures (rouge =1600K, bleu clair 1700K, orange 1800K, noir 1900K et bleu foncé 2000K)

On note que les valeurs obtenues par dynamique moléculaire sont du même ordre de grandeur que celles trouvées expérimentalement. On observe néanmoins une transition plus forte en terme de viscosité pour les températures les plus faibles. La forte variation à 1600K est expliquée par un ordre local initial qui est détruit pour une pression de -2.6kbars. A partir de cette pression on retrouve un comportement liquide comme pour les plus hautes températures. En effet, on peut observer un changement de piézodépendance de la viscosité en fonction de la dépression du système. Dans ce cas, on peut voir une équivalence entre dépression et augmentation de la température. Cette diminution de viscosité est cohérente avec la faible énergie de surface déduite d'une forte dépression. Sous forte dépression, la diminution de viscosité accroît les possibilités d'alimentation par du métal fondu.

d) Influence de la température sur la viscosité :

Nous nous intéressons à la thermo dépendance de la viscosité à pression atmosphérique. Comme le montre la Figure 164, la viscosité décroît logiquement quand la température augmente. Les points obtenus pour des valeurs inférieures à la température de fusion, sont obtenus sur des systèmes toujours à l'état liquide, mais en surfusion. Comme on

a pu le constater sur le graphique précédent, ceci se vérifie ici aussi, à savoir un bon accord entre les données expérimentales et les simulations dynamique moléculaire.

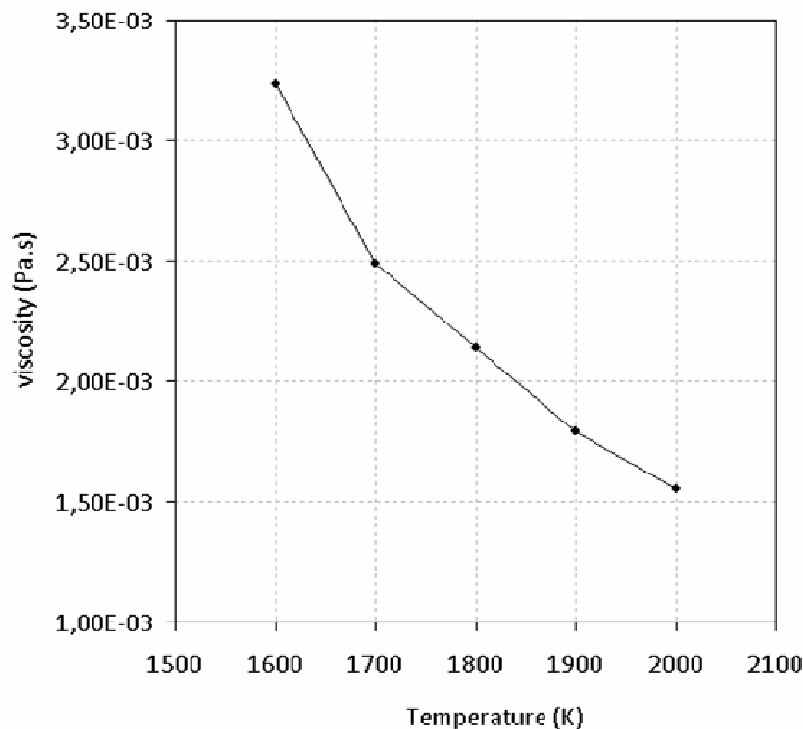


Figure 164 : variation de la viscosité en fonction de la température à pression atmosphérique

En résumé de cette partie consacrée à la viscosité à l'état liquide, nous pouvons noter que les valeurs trouvées numériquement coïncident avec les données expérimentales disponibles. Mais la dynamique moléculaire offre également la possibilité d'explorer les évolutions en pression et température de ces valeurs. Peut on en déduire une énergie apparente d'activation de la viscosité ? Boltzmann quoi !

D. Croissance des cavités

Si on observe maintenant la cinétique de la bulle, non plus d'un point de vue de l'apparition d'une cavité, mais plutôt en terme de croissance, on constate qu'après son apparition la bulle croît très rapidement. En effet si on considère que la bulle qui vient d'être créée voit son rayon croître et atteindre de 14 Å après 4,12 ps, ceci correspond à une vitesse de déplacement de la paroi égale à 331 m/s. On peut estimer qu'avec une telle vitesse de propagation, lors de sa croissance la cavité va produire une onde de pression. Cette onde de pression pouvant participer à la rupture des dendrites.

4.3 Propriétés de la zone semi solide

Comme nous l'avons vu précédemment, l'utilisation de critère de fissuration de type RDG nécessite de connaître le comportement et la cinétique de la zone fondue ; mais lors de la cavitation cette zone fondue se trouve piégée dans du solide sous forme de film liquide.

Ainsi l'influence du solide sur le comportement liquide ne peut pas être totalement négligé. Une telle interface soulève de nombreuses questions. Quelle est la structure et la dynamique d'une couche de liquide au voisinage d'une surface solide ? Favorise t'elle la formation d'une bulle par rapport à l'état complètement fondu ? Répondre à ces questions est essentiel pour l'étude des liquides en milieux confinés.

A. Cavitation semi solide

Ces simulations DM ont été réalisées sur un système de plus grande taille composé de 96000 atomes de fer. Ce réseau est composé d'un cristal de fer solide de structure CFC, ces 64000 atomes enserrant 32000 atomes de fer liquide. Du fait des conditions triplement périodiques, le système correspond à un multi «sandwich » composé de cristal deux fois plus épais que de fer fondu.

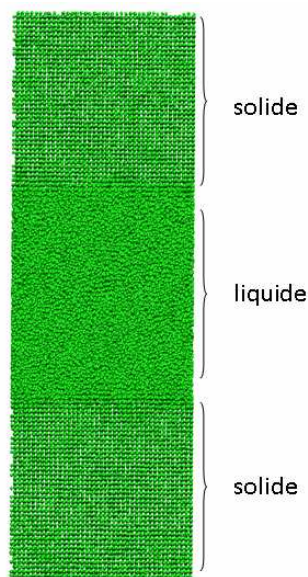


Figure 165 : géométrie de la structure semi solide étudié par dynamique moléculaire.

Comme précédemment, les simulations étant réalisées dans un ensemble thermodynamique NVT, la taille de la boîte de simulation est augmentée par paliers successifs, suivant l'épaisseur. Ces simulations plus complètes permettent de mieux appréhender le comportement proche des interfaces liquide-solide lors de la solidification.

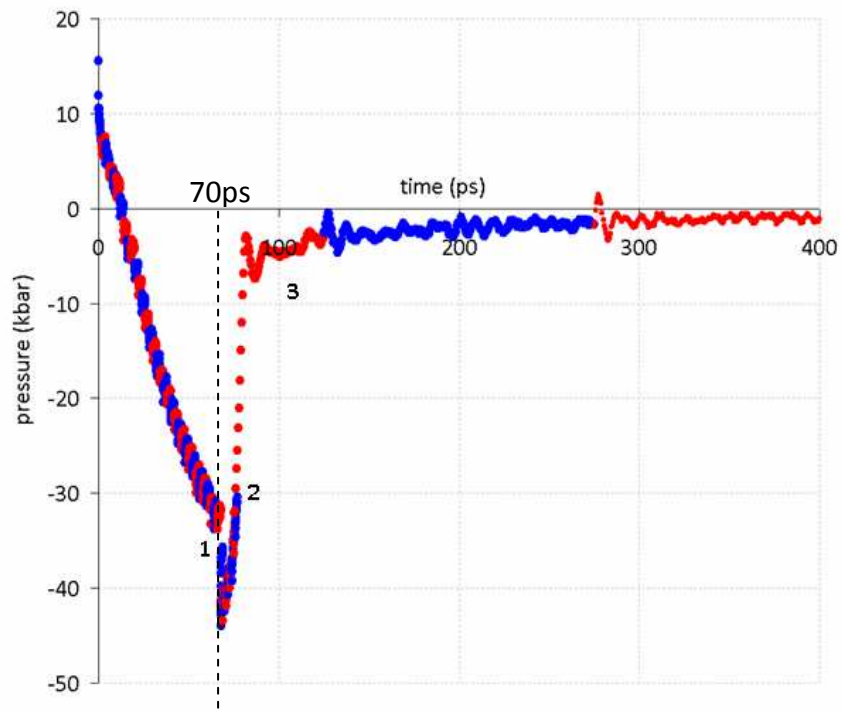


Figure 166 : évolution de la pression de cavitation à semi solide.

La pression de cavitation en semi-solide est très proche de la valeur obtenue à l'état fondu. Il ne semble pas que l'on puisse dire que l'amorçage se produira préférentiellement dans la veine fondu ou proche d'une interface cristal/fondu. Sur la Figure 166 hormis les phases déjà observées lors de la cavitation en phase totalement liquide, on peut distinguer trois zones dont l'évolution de la courbe mérite une explication. Ces trois zones étant distinguées sur la courbe à l'aide d'une numérotation. Pour les comprendre il faut mettre en vis-à-vis l'évolution morphologique (Fig. 164) et l'évolution de la pression (Fig.162). Ces trois zones se caractérisent par différentes périodes d'évolution de l'épaisseur de la partie liquide (Fig. 163).

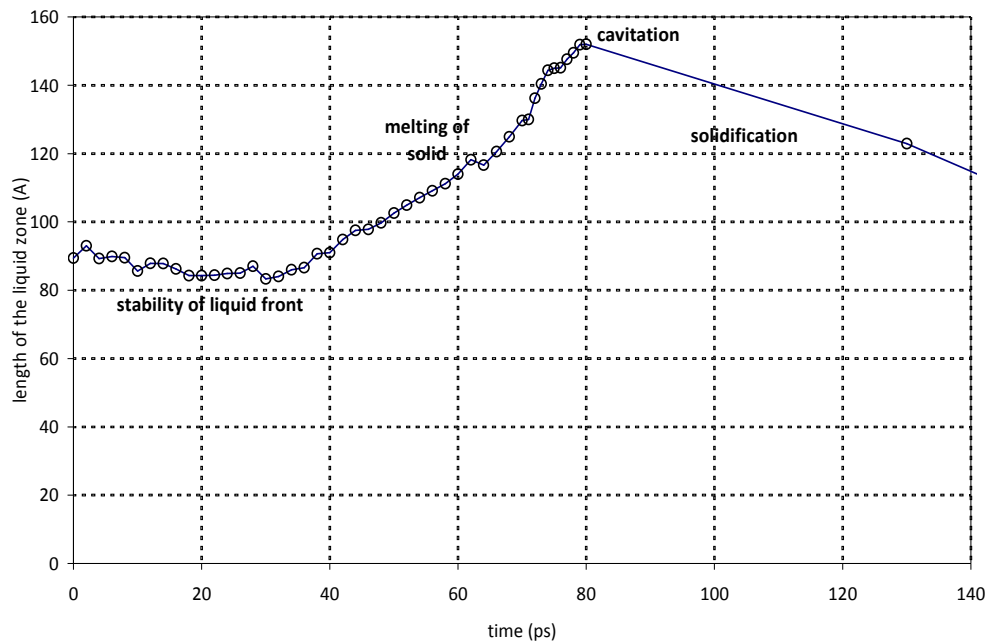


Figure 167 : évolution de l'épaisseur de la zone liquide avant et après cavitation.

- Un premier intervalle de temps numéroté 1, pendant lequel on assiste à une forte dépression sans cavitation qui, comme le montre la Figure 167, après une première période durant laquelle l'interface liquide solide est stable, la dépression, au-delà de -13 kb, va faire croître l'épaisseur de la zone liquide et donc la fusion partielle du cristal. La dépression augmente la mobilité des atomes dans la phase fondue (le coefficient de diffusion augmente et par conséquent la viscosité diminue), ce qui va provoquer la fusion. Ceci provoque également une diminution de la température d'équilibre thermodynamique, on observe donc les mêmes effets que lors de la fusion à température imposée.

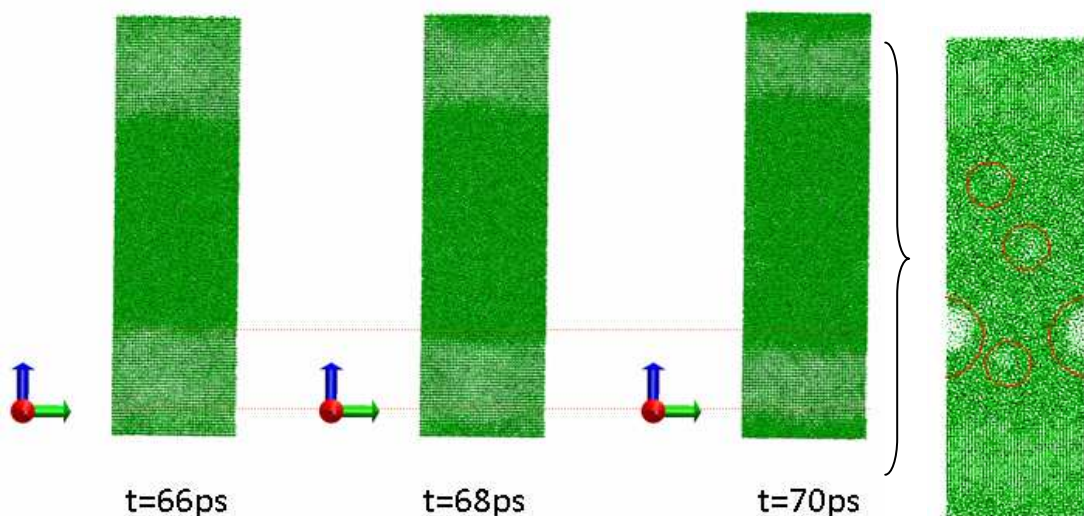


Figure 168 : évolution du front de fusion et apparition des premières cavités

Jusqu'à 70 ps la veine fondue reste apparemment homogène (Fig. 164). Au-delà, de multiples petites cavités apparaissent sur une coupe, cercles rouges sur la figure 164. Ces cavités ont pour conséquence de faire diminuer la pression (en valeur absolue) à l'intérieur du système. Ces cavités multiples sont caractéristiques de ce système partiellement fondu alors qu'une seule et unique cavité apparaît dans tous les systèmes entièrement fondus. Les différentes cavités évoluent en faisant disparaître les plus petites au profit de la croissance de la plus grosse. Le processus d'apparition est apparemment différent dans les états fondu et semi-solide, mais ils conduisent à la formation d'une seule bulle dans le volume considéré. Il est également possible de déterminer une énergie de surface à partir de l'équation de Laplace. Nous obtenons la même énergie de surface.

A partir de 70 ps, après cavitation en de multiples cavités, alors que la dépression se réduit (Figure 166), le cristal cesse de fondre (Figure 167). Comme le montre la Figure 168, qui présente d'une part l'évolution de l'interface solide-liquide, confirmant ainsi que la dépression favorise la fusion du système. La densité moyenne d'atomes dans la zone liquide décroît naturellement de façon régulière et continue durant toute la période de mise en dépression du système (Fig. 165). Ceci s'explique très bien par l'augmentation régulière de la taille du système et donc les atomes ont plus d'espace. Néanmoins sur cette Figure 169, on observe une variation rapide qui traduit l'apparition de cavités.

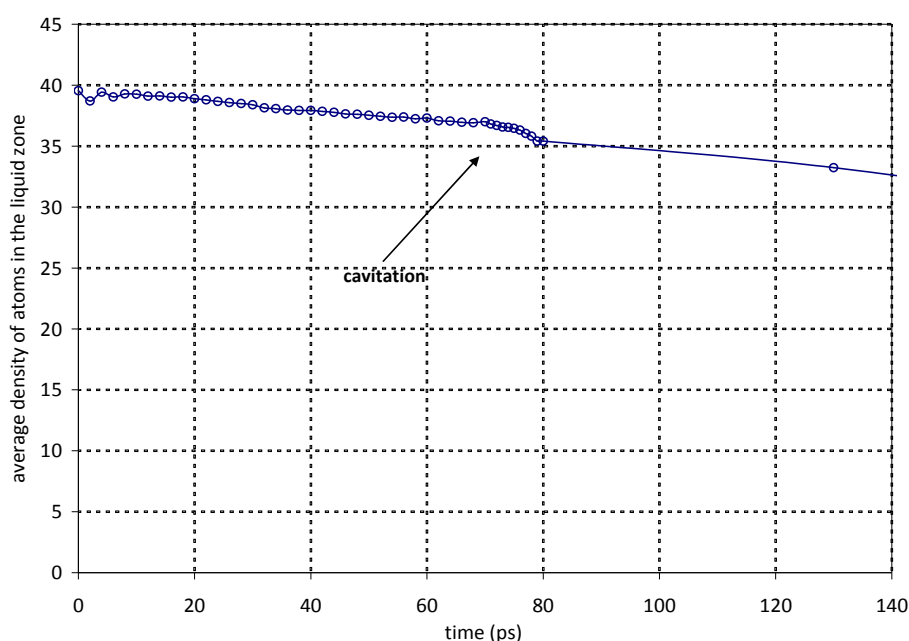


Figure 169 : évolution de la densité moyenne d'atomes dans la zone liquide. On remarque deux phases, une première durant laquelle la densité décroît linéairement et de façon modérée, puis une seconde phase où la décroissance est plus forte. Ce changement de pente traduit l'apparition d'une cavité.

- Durant la deuxième période la pression augmente durant la croissance de la bulle (Fig. 166, de 75 à 85 ps).

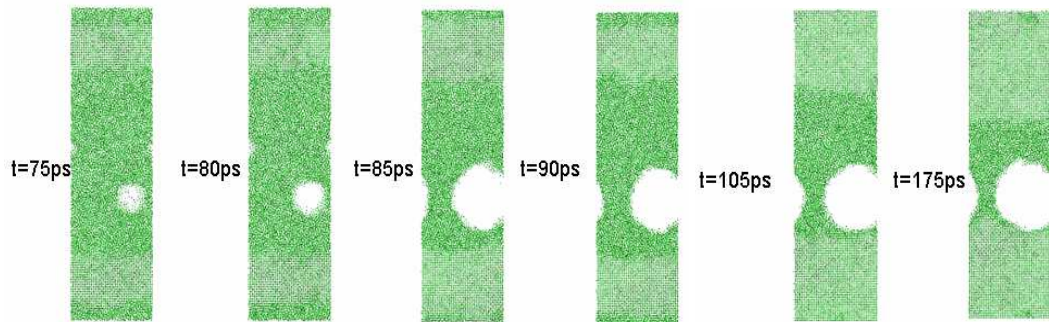


Figure 170 : évolution de la cavité et propagation du front de solidification

On peut noter que la vitesse de décroissance de la pression (Fig. 162) est plus faible que dans le cas du métal complètement liquide (Fig. 154). En fait les mécanismes rentrant en jeu dans le cas semi-solide sont beaucoup plus complexes que dans le cas liquide.

En fait comme nous l'avons vu, si la mise en dépression du système favorise la fusion en abaissant le point de fusion du cristal. La réduction de la dépression provoquée par l'apparition d'une cavité tend donc à augmenter la température de fusion et donc à favoriser la solidification. Néanmoins en se solidifiant, puisque les simulations sont réalisées dans un ensemble thermodynamique de Gibbs (NVT), le cristal de fer ayant une densité plus forte que le fer liquide tend à mettre en dépression le système. Mais comme on peut le constater sur la Figure 166 ceci n'est pas le cas, en effet la pression continue à croître. La cavitation est donc le paramètre majeur contrôlant la pression.

On peut donc en déduire qu'il existe une relation étroite liant vitesse du front de solidification et vitesse de croissance de la bulle.

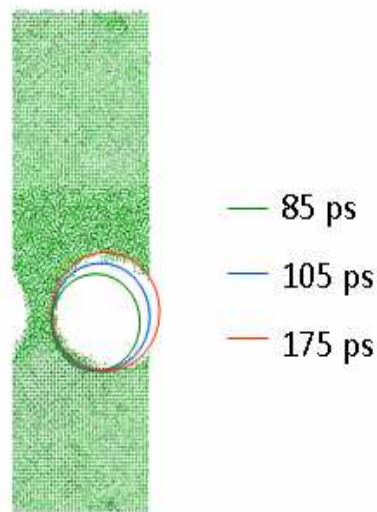


Figure 171 : évolution de la cavité et propagation du front de solidification

- Enfin une dernière période correspondant à la stabilisation de la bulle formée. Durant un début de stabilisation de la pression vers -4 kb, le cristal commence à croître (Fig. 166, 85ps). Cette croissance continue du cristal (Fig. 168) provoque une augmentation continue de la taille de la bulle (Fig. 167). Dans les derniers stades de la simulation la cavité est en contact direct avec le cristal, ce qui stoppe localement la croissance du cristal (Fig. 167). On peut observer ceci sur la Figure 172, où l'on note qu'entre $t = 125$ ps et $t = 250$ ps, le front solide progresse. Mais à partir de $t = 250$ ps, ce dernier se fixe. Et comme le montre la Figure 167, l'équilibre final entre la zone solide et la zone liquide se fait pour des proportions solide liquide proches de celles trouvées initialement (Fig. 169). La pression est alors proche de -1kb (Fig. 162). On ne peut plus appliquer directement la loi de Laplace du fait de la présence importante du cristal qui perturbe la détermination de la pression dans la veine liquide.

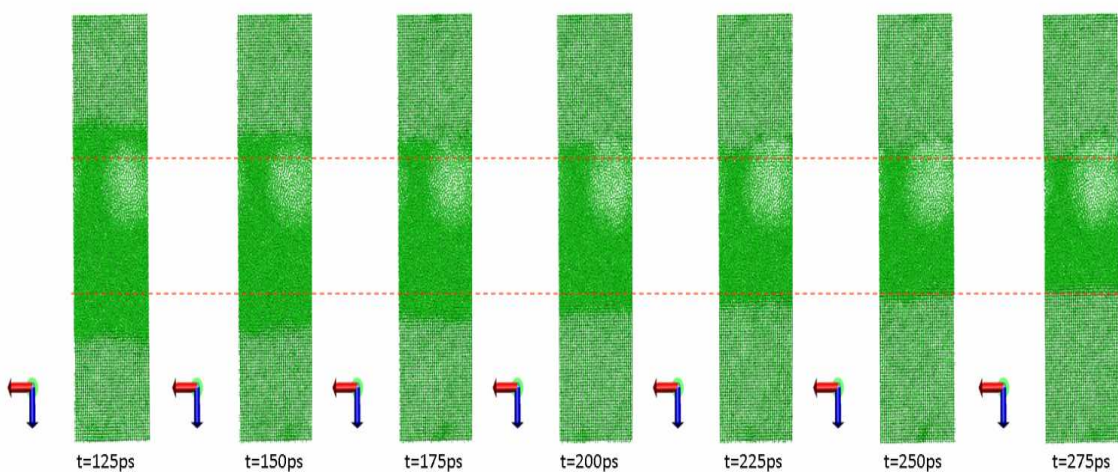
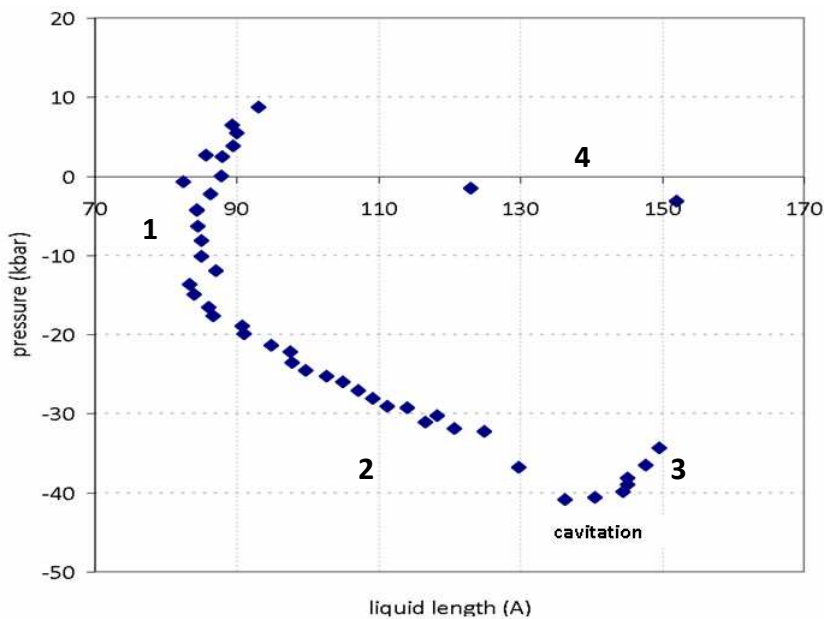


Figure 172 : évolution de l'interface solide/ liquide**Figure 173 : évolution de l'interface solide/ liquide**

Même si cette simulation est réalisée dans des conditions isothermes on peut très bien envisager de l'extrapoler à la solidification. Nous réaliserons un parallèle entre ce que l'on observe en condition isotherme et ce qui pourrait être observé en conditions réelles.

Donc comme la vitesse de fusion dépend de la dépression, ce qu'on observe à l'échelle de la dynamique moléculaire doit exister à des échelles plus grandes. Si on cherche à extrapoler à l'échelle de temps expérimentale ce qui se passe au cours d'une mise en dépression très rapide telle qu'on la produit à l'échelle de la dynamique moléculaire, on va déduire une décroissance des dendrites sous dépression. Calculons la vitesse du front solide liquide lors de la mise en dépression du système. Sur la Figure 167, on note que la zone solide décroît d'environ 70 Å en 45 ps, ce qui correspond à une vitesse de l'interface de 1 Å/ps, soit environ 100 m/s. Cette vitesse de fusion croît avec la dépression, de 90 m/s pour -13 kb à 125 m/s pour -31kb. Ces vitesses de fusion sont très importantes. Quelle peut être son importance pour des temps de mises en dépression très courts. Si on considère une dépression en une micro seconde alors une épaisseur de 0,1 mm de cristal devrait fondre. Donc localement les dendrites seraient en grande partie refondues en fond de zone dendritique. Ceci peut avoir deux conséquences. D'une part, une fusion suffisante qui permette de réalimenter le domaine confiné avec du métal fondu et, d'autre part, fragiliser mécaniquement les dendrites.

La fusion locale aboutissant à une réouverture de la cavité. La faible viscosité du métal, amplifiée par l'effet d'une dépression (Fig. 159), peut permettre de réalimenter la cavité liquide et faire croître la pression avant que la pression critique de cavitation soit atteinte. Alors la zone peut recristalliser, du fait de la diminution de la dépression.

La fusion partielle localement, sans réouverture de la cavité, peut donner des conséquences potentiellement beaucoup plus graves. L'affaiblissement de la structure dendritique locale couplé à l'onde de pression provoquée par la croissance de la cavité pourrait fragiliser la structure dendritique, localement amincie. Si tel était le cas, l'amorçage de la cavitation serait une clé pour expliquer le lien entre cavitation et rupture des dendrites. Dans ce cas, la séquence suivante peut être proposée à la suite de ces simulations par dynamique moléculaire. L'amorçage de cavités se produit par dépression, la structure dendritique localement refond, elle subit une onde de pression pouvant la rompre, la pression augmente et fait recristalliser la dendrite. Si tel est le cas, au site d'amorçage de la fissuration des dendrites devraient présenter une structure cœur/peau (fusion recristallisation) associée à une amorce de rupture. Ce mécanisme prévisible doit certainement être difficile à mettre en évidence.

Il est nécessaire de connaître les propriétés mécaniques du cristal à très haute température, température de cristallisation des dendrites.

5. Etude du comportement mécanique de mono cristaux de fer

Le comportement mécanique, comme nous avons pu le voir dans les chapitres précédents est un sujet vaste et complexe, dont les mécanismes, qu'ils soient élastiques, plastiques ou visqueux, jouent à différentes échelles. Jusqu'ici dans ce chapitre la dynamique moléculaire avait été utilisée pour comprendre et tenter d'expliquer certains phénomènes provoquant la fissuration à chaud des aciers. Mais le comportement mécanique qui a été le fil conducteur de cette thèse restait à étudier à l'échelle micro. Notons que dans le cadre de simulations à l'échelle d'un VER, telles que celles réalisées dans le cadre du projet Cracracks [Sun], ces propriétés peuvent prendre tout leur sens. Ici dans une première approche, nous nous intéresserons uniquement aux propriétés élastiques des matériaux. Nous déterminerons, dans un premier temps, le module élastique pour la direction cristallographique (100) et, dans un deuxième temps, les composantes du tenseur d'élasticité. Ces prédictions seront réalisées de 300K à 1800K.

Les propriétés mécaniques telles que le module d'Young, le coefficient de Poisson ou le module de compressibilité sont dépendantes de deux phénomènes qui peuvent influencer sur ces valeurs :

- La structure atomique
- Les propriétés des joints de grains

Etudions comment ces propriétés peuvent être déterminées à l'échelle atomique. Dans cette section nous nous sommes intéressés aux propriétés mécaniques d'un monocristal de fer d'orientation cristalline [010] et plus précisément les propriétés élastiques et leur évolution thermique.

Pour cela, on considère un cristal de forme parallélépipédique constitué de 10000 atomes d'orientation cristalline [010]. Tous les calculs ont été menés dans un ensemble thermodynamique NVT, cet ensemble permettant de fixer la taille de la boîte de simulation et donc de pouvoir faire subir des déformations au cristal. Si on considère un tel système thermodynamique pour réaliser nos simulations, cela implique qu'initialement le système soit parfaitement équilibré, c'est-à-dire avoir non seulement une trace du tenseur des contraintes nulle mais aussi que chaque terme de ce tenseur soit lui-même nul.

Pour déterminer les propriétés élastiques de ce système, nous allons le soumettre à un essai de traction uni axial. Afin de déterminer des valeurs correctes, cet essai de traction doit être réalisé en état de contrainte plane, c'est-à-dire que nous devons diminuer la section du système proportionnellement à l'allongement qu'il subit. Il est donc nécessaire de connaître à la fois l'évolution du paramètre de maille en fonction de la température, de connaître le coefficient de compressibilité ou bien encore le coefficient de Poisson du fer [010].

5.1 Propriétés statiques

Pour chaque température, il faut que le système soit à l'équilibre. Cela nécessite de définir le module de compressibilité du cristal. Puis à partir d'une première simulation de déterminer les paramètres de maille pour chaque température et ainsi de définir le coefficient de dilation du système. En effet pour déterminer les paramètres de mailles à toutes les températures nous avons appliqué le même schéma, qui nous détaillons ci-dessous :

1. A partir d'un système initial à une température T fixée dans un état de contrainte donnée. Nous soumettons ce système à un ensemble de petites perturbations compression ou traction dans les trois directions de l'espace. Si le système était cubique, les sollicitations seraient les mêmes dans les trois directions. Ces différentes perturbations nous permettent d'obtenir un ensemble de valeurs de pression dépendantes du volume pour une température donnée. A partir de ces données nous pouvons obtenir le coefficient de compressibilité pour un monocristal de fer [010].

Ainsi nous avons pu déduire le module d'élasticité (bulk modulus) du système [010], pour ce système la valeur trouvée est égale à 168 GPa. Cette valeur est très proche des valeurs obtenues expérimentalement 166,2 [Adams 06]. Nous considérerons que ce coefficient n'est pas thermodépendant.

2. une fois déterminé ce paramètre, nous avons réalisé un ensemble de calculs pour différentes températures, ces calculs non équilibrés mécaniquement ont chacun leurs propres conditions de pression.
3. En appliquant le coefficient de compressibilité sur ces valeurs, nous pouvons déterminer une nouvelle taille de boîte équivalente à un système à l'équilibre mécanique. A partir de ce nouveau système, nous effectuons sur un calcul relativement lent, un équilibrage du système pour vérifier que la pression est bien nulle à l'intérieur du système.

4. Ainsi nous obtenons la variation du volume d'un système en fonction de la température. De cette évolution nous pouvons déduire l'évolution du coefficient de dilatation linéaire. Cette évolution est présentée par la Figure 174. Si on considère les références présentées plus haut pour le coefficient de dilatation de la phase CFC entre 1100 K et 1600 K (paragraphe 4.1 B. on remarque qu'une fois encore les ordres de grandeur sont bons.

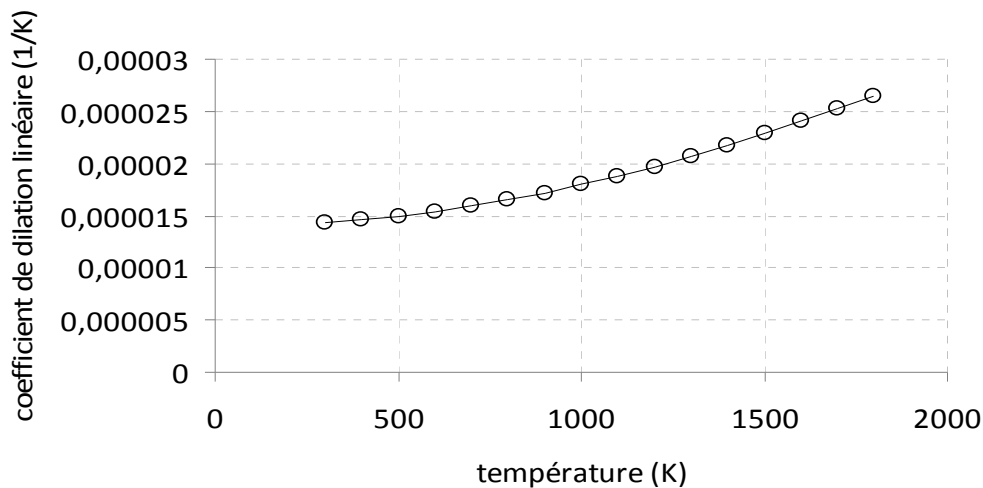


Figure 174 : évolution du coefficient de dilatation linéaire en fonction de la température.

5.2 Module d'élasticité

Une fois obtenue l'ensemble des conditions initiales mécanique à l'équilibre, nous pouvons solliciter ces systèmes pour différentes températures afin de déterminer un module d'Young. Néanmoins, le fer n'étant pas incompressible, lorsqu'il va être sollicité en traction il nous faut donc déterminer ~~un~~ le coefficient de Poisson pour la direction cristallographique considérée.

Pour déterminer le coefficient de Poisson de notre matériau, nous avons soumis un système à différentes sollicitations en traction (0,1 %, 0,2% et 0,5% de déformation) pour différentes valeurs du coefficient de Poisson comprises entre 0,2 et 0,41. Ces différents calculs nous ont permis d'obtenir une valeur du tenseur des contraintes du système en fonction du coefficient de Poisson. Comme nous nous sommes placés dans un état de contraintes planes, les contraintes latérales doivent être nulles. Comme le montre la Figure 175 nous avons suivi l'évolution de la contrainte latérale en fonction du coefficient de Poisson et par simple extrapolation nous en avons déduit la valeur du coefficient de poisson pour laquelle la contrainte latérale est nulle. Dans le cas d'un mono cristal de fer [010], le coefficient de Poisson est égal à 0.41. Dans la littérature on trouve des valeurs comprises entre 0,365 [Dever 72] et 0,385 [Leese 68]. Comme le montre la Figure 177b, la valeur du coefficient de Poisson dépend de l'orientation cristalline des systèmes.

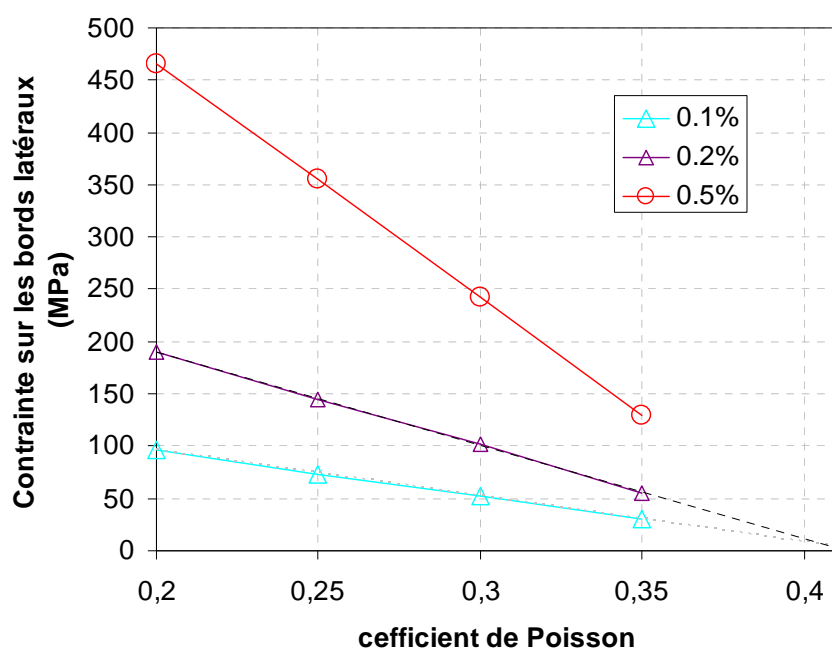


Figure 175 : évolution contrainte latérale lors d'un essai de traction pour différentes valeurs de coefficient de Poisson. La valeur du coefficient de Poisson pour laquelle on se situe dans un état de contrainte plane est 0.41.

Une fois connue la valeur du coefficient de Poisson de notre système, nous avons pu déterminer le module d'Young. Pour cela à partir des systèmes équilibrés et en utilisant le coefficient de Poisson déterminé précédemment, nous avons sollicité notre système en contraintes planes.

Nous avons ainsi pu déterminer l'évolution du module d'Young (Fig. 172).

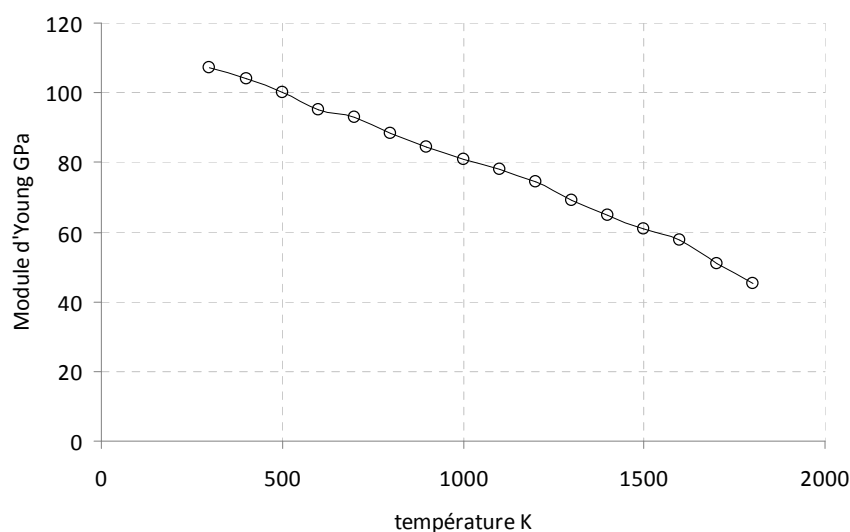


Figure 176 : évolution du module d'Young en fonction de la température.

On note tout d'abord une valeur assez faible du module à 300K, alors que pour un acier la littérature donne typiquement des valeurs aux environs de 200GPa. Mais cette valeur n'est en rien surprenante, en effet si on regarde d'un peu plus près la littérature, on note qu'il existe une forte variation des valeurs du module d'Young en fonction de l'orientation cristalline. Des valeurs de [Askeland06] avance des valeurs comprises entre 120GPa et 260Gpa pour respectivement des orientation [100] et [111]. Quant à [Adams 06] il avance la valeur de 130 GPa à 300K et 119 GPa à 500K (Fig. 173a).

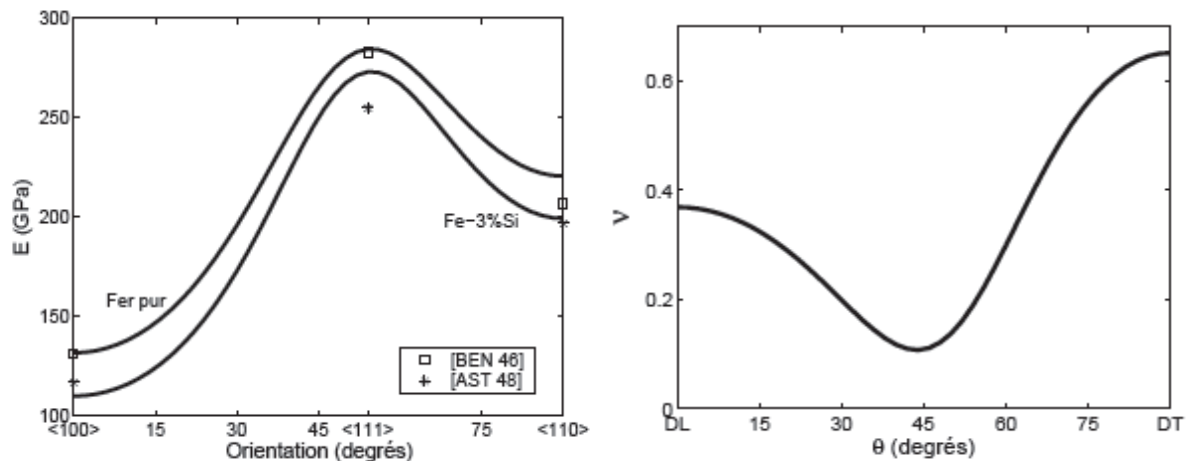


Figure 177 : évolution du module d'Young (à gauche) et du coefficient de poisson pour du fer-3%Si (à droite) en fonction de l'orientation cristalline [Daniel03].

5.3 Tenseur d'élasticité

Le tenseur d'élasticité d'un cristal cubique faces centrées (CFC) se comporte que trois composantes : C_{11} , C_{12} et C_{44} . Nous avons vu que le critère de Cauchy $C_{12}=C_{44}$ n'est pas respecté dans les métaux de transition. C'est une des causes de l'établissement des champs de force, dont celui appliqué durant toute cette étude. Pour mesurer ces composantes il faut au minimum appliquer trois types de sollicitations indépendantes. Il faut appliquer une compression hydrostatique, une traction et un cisaillement en conditions isovolumiques. Nous avons en fait appliqué une quatrième sollicitation pour vérifier les résultats : une traction biaxiale isovolumique. Nous avons, comme pour la détermination du module d'élasticité (chapitre 5.2), équilibré très précisément le système pour que les composantes du tenseur de pression soit quasiment nulles, quelle que soit la température de simulation. Nous avons appliqué une déformation de 0,1% en compression, en tractions uni et biaxiale isovolumique, et en cisaillement pur isovolumique. Nous obtenons l'évolution suivante qui a été comparée à des mesures expérimentales sur un monocristal de fer pur ([Becquart05]) (Figure 179).

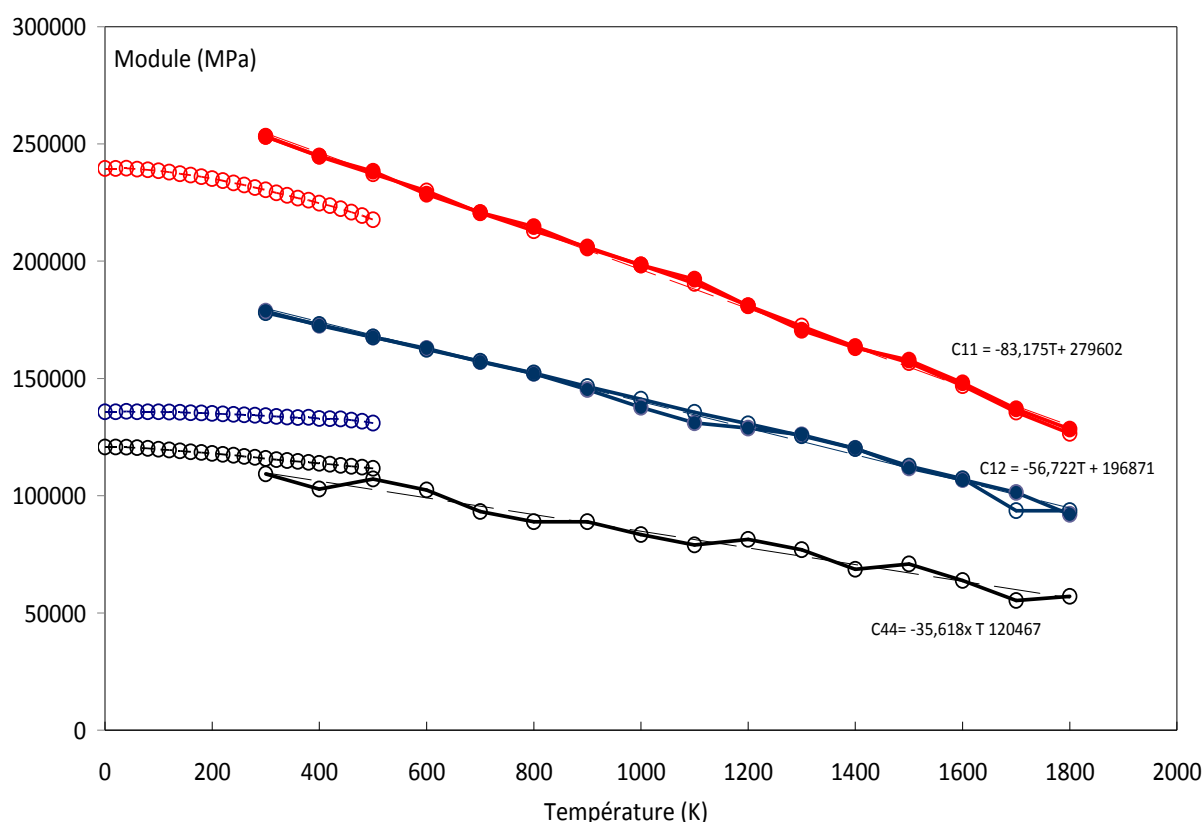


Figure 178 : évolution des composantes du tenseur d'élasticité en fonction de la température et comparaison avec des données expérimentales.

Nous retrouvons un écart entre les composantes C12 et C44. Cet écart est plus important que celui déduit des expériences. Cet écart est certainement dû à un ajustement imparfait des paramètres du champ de force. Cependant, nous trouvons des valeurs assez comparables aux valeurs expérimentales dans le domaine des basses températures. C'est le domaine des hautes températures qui nous importe principalement dans cette étude. Il apparaît que les composantes du tenseur d'élasticité diminuent seulement d'un facteur deux entre 300K (température ambiante) et 1800K (température de fusion). Cette faible diminution des propriétés mécanique n'est pas la cause principale de la fragilité des dendrites à haute température.

6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une méthode et des résultats qui peuvent paraître exotiques par rapport au reste du travail effectué dans cette thèse.

Ce travail peut représenter d'une part une partie amont indispensable pour les simulations d'interactions solide liquide à l'échelle d'un VER, telles que celles effectuées par ailleurs dans le cadre du projet cracracks [Sun07] ou celles qu'on voit apparaître de plus en plus dans la littérature. Ces travaux portent sur la simulation numérique de la déformation mécanique du semi-solide à l'échelle d'un VER. Ces simulations sont réalisées pour l'instant avec un comportement newtonien pour le solide. Selon ces simulations, le comportement du semi-solide est influencé par différents paramètres tels que la fraction solide, la vitesse de déformation, la morphologie et la topologie du squelette solide. Donc la dynamique moléculaire peut être un moyen d'alimenter ce type de calculs en données rhéologiques pour la structure solide, en viscosité pour le liquide et en tension de surface pour l'interface.

D'autre part, ce chapitre permet d'expliquer certains phénomènes et certaines évolutions difficilement observables, et d'apporter une vision différente sur les problèmes de fissuration. Cette approche avait déjà été entamée par [Asta09].

Dans ce chapitre nous avons donc adapté un modèle de dynamique moléculaire basé sur un champ de force de type Rosato et nous l'avons validé par comparaison avec des propriétés thermo physiques disponibles dans la littérature.

Ce modèle mis en place, même s'il représente un domaine spatial très réduit, permet d'étudier localement des comportements très différents. Il nous a donné accès à de multiples informations permettant la compréhension des phénomènes entrant en jeu lors de la cavitation quelle soit à l'état liquide ou semi solide. En effet ceci est d'autant plus important que du fait de la présence d'interfaces liquide solide qui sont spatialement très étroites on assiste à de très fortes variations de propriétés.

Au vu des résultats, il semble que cavitation soit un phénomène majeur pouvant intervenir lors de la mise sous contrainte de zones liquides. Mais elle nécessite l'existence de très fortes dépressions pour être amorcée. Cette hypothèse a été avancée mais n'a pas pu être vérifiée. De plus les viscosités déterminées par dynamique moléculaire, très faibles, sont conformes aux valeurs expérimentales. Si la cavité n'est pas close, la faible viscosité peut permettre de l'alimenter. C'est pour cette raison que l'amorçage ne peut se faire que dans une zone interdendritique confinée.

Nous avons pu aussi constater que les pressions de cavitation déterminées par dynamique moléculaire étaient très élevées ce qui est probablement dû à l'absence d'hétérogénéité dans nos systèmes, la cavitation est de type homogène. Donc une des prochaines évolutions pourrait être l'ajout d'éléments autres que le fer. Des travaux ont déjà été publiés dans la littérature sur ce sujet, notamment avec l'ajout de carbone

[Bhadeshia 04], ou encore sur des interactions Fe-N [Becquart 05]. Le principal problème pour les interactions multi corps est d'identifier des potentiels réalistes pour définir les interactions couplées.

Enfin dans une dernière partie nous avons présenté des premiers résultats de comportement mécanique en élasticité. Ils montrent que les composantes du module d'élasticité sont élevées et ne sont pas la cause directe de la fragilité des dendrites à la température de solidification. Le passage à la plasticité peut par contre s'avérer plus difficile.

Donc comme on le voit, de nombreuses choses restent à faire en dynamique moléculaire, mais le travail réalisé a permis de jeter des bases solides pour la suite, notamment sur le choix d'un potentiel et sur la détermination des paramètres qui le composent. Cette simulation permet de proposer un scénario sur les mécanismes à l'origine de la fissuration à chaud.

Bibliographie

- [Asta09] M. Asta, C. Beckermann, A. Karma, W. Kurz, R. Napolitano, M. Plapp, G. Purdy, M. Rappaz, and R. Trivedi, (2009), Solidification Microstructures and Solid State Parallels: Recent Developments, Future Directions, *Acta Materialia*, **57**, pp941-971
- [Adams06] J. J. Adams, D. S. Agosta, R. G. Leisure, H. Ledbetter , (2006), Elastic constants of monocrystal iron from 3 to 500 K, *Journal of Applied Physics*, **100**, 113530
- [Askelan06] D. Askeland, P. Phule, (2006) The science and Engineering of Materials, Thomson
- [Alder63] : B.J. Alder, G.C. Kennedy, R.C. Newton, (1963), Solids Under Pressure , *W. Paul, D. Warschauer* , McGraw-Hill Book Company.
- [Babyuk74] : T.I. Babyuk, G. Kushta, V. Mikhal'chenko, (1974), Concerning some parameters of the gamma Fe lattice dynamics according to X ray diffraction data , *Physics of metals and metallography*, **38**, pp.56.
- [Basinski55] : Z.S. Basinski, R.W. Hume, A.L. Sutton, F.R.S. Sutton, (1955), the lattice expansion of Iron , *Proceeding Royal society London A*, **229**, pp.459.
- [Becquart05] C. S. Becquart, C. Domain and J. Foct, (2005), Ab initio calculations of some atomic and point defect interactions involving C and N in Fe, *Philosophical Magazine*. **85**, pp 533–540
- [Bendick82] : W.O. Bendick, W. Pepperhoff, (1982), on the

alpha/gamma phase stability of Iron , *Acta Metallurgica*, **30**, pp.679.

[Bhadeshia04] H Bhadeshia (2004) Carbon-Carbon interactions in iron, *Journal of Materials Science*, **39**, p3949

[Born32] : M. Born, J.E. Mayer, (1932), Zur Gittertheorie der Ionenkristalle , *Zeitschrift für Physik a Hadrons and Nuclei*, **75**, pp.1.

[Buckingham38] : R.A. Buckingham, (1938), The Classical Equation of State of Gaseous Helium, Neon and Argon , *Proceedings of the Royal Society of London A*, **168**, pp.264.

[Campbell68] : J. Campbell, (1968), The tribonucleation of bubbles , *Journal of Physics D: Applied Physics*, **1**, pp.1085.

[Cezairliyan73] : A. Cezairliyan, J.L. McClure, (1973), Thermophysical measurements on a Iron above 1500K Using a transient technique , *Applied Physics and chemistry*, **78A**, pp4 .

[Cockett63] : G. Cockett, C. Davis, (1963), The lattice expansion of Fe-Si alloys and the volume change at the A3 point , *Journal of the Iron and steel institute*, pp.110.

[Collins78] : G. Collins, (1978), The Virial Theorem in Stellar Astrophysics , Pachart Press.

[Daw83] : M. Daw, M. Baskes, (1983), Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals , *Physical Review letter*, **50**, pp.1285.

- [Desai86] : P.D. Desai, (1986), Thermodynamic properties of Iron and Silicon , *Journal of Physical chemistry*, **15**,pp967 .
- [Desjonqueres96] : Desjonquères, M. and Spanjaard, D. (1996).Étude théorique de divers processus atomiques de croissance sur les surfaces métalliques.*journal de physique IV*, **C7**, pp19.
- [Dever72] DJ Dever Temperature dependence of the elastic constants in α -iron single crystals: relationship to spin order and diffusion anomalies, *Journal of Applied Physics*, **43**, pp3249
- [Drezet02] : J.-M. Drezet, M. Gremaud, M. Graf, R. Gaumann, (2002), A new hot tearing criterion for steel , *Proceedings of the 4th European Continuous Casting Conference*, pp775.
- [Drotning81] : W. Drotning, (1981), Thermal expansion of Iron cobalt nickel and copper at temperature up to 600K above melting , *High temperatures - High pressures*, **13**, pp.441.
- [Ducastelle91] : F. Ducastelle, (1991), Computer Simulation in Materials Science , *M.M., P.V.* , Kluwer Academic.
- [Ducastelle72] : F. Ducastelle, (1972), Contribution à l'étude de la structure électronique des métaux de transition et leurs alliages, thèse de doctorat, *Université de Paris sud, Centre d'Orsay*.
- [Ducastelle70] : F. Ducastelle, F. Cyrot-Lackmann, (1970), Moments developments and their application to the electronic charge distribution of d bands , *Journal of physical chemicals solids*, **31**, pp.1295.
- [Einstein05] A. Einstein, (1905), Investigations on the theory of the brawnian movement, Dover Publications, ed by Fürth in 1956

- [Finnis84] : M. Finnis, J. Sinclair, (1984), A simple empirical N-body potential for transition metals , *Philosophical Magazine A*, **50**, pp.45.
- [Fisher48] : J.C. Fisher, J.H. Hollomon, D. Turnbull, (1948), Nucleation , *Journal of Applied Physics*, **19**, pp.775.
- [Friedel69] : J. Friedel, (1969), The Physics of Metals, part 1, Electrons , *J. Ziman* , Cambridge University Press.
- [Harris85] : J. Harris, (1985), Simplified method for calculating the energy of weakly interacting fragments , *Physical Review B*, **31**, pp.1770.
- [Hayoun 08] M. Hayoun, (2008) Modélisation et simulation numérique, cours master, Université Pierre et Marie Curie
- [Hoyt01] : J. Hoyt, M. Asta, A. Karma, (2001), Method for Computing the Anisotropy of the solid-Liquid Interfacial free Energy , *Physical review Letters*, **86**, pp.5530.
- [Johnson64] : R. Johnson, (1964), Interstitials and vacancies in alpha iron , *Physical Review*, **134**, pp.1329.
- [Kohlhaas67] : R. Kohlhaas, P. Dünner, N. Schmitz Pranghe, (1967), Über die temperaturabhängigkeit der gitterparameter von Eisen Kobalt und Nickel Im bereich hoher temperaturen , *Zeitung Angewandte Physik*, **23**, pp.245 .
- [Kojima04] : R. Kojima, M. Susa, (2004), Second moment approximation of tight binding potential for gamma Fe applicable up to 1700K , *Science and technology of advanced materials*, **5**, pp.497.

- [Leese68] J. Leese and A. E. Lord, (1968), Elastic Stiffness Coefficients of Single - Crystal Iron from Room Temperature to 500°C , *Journal of Applied Physics*, **39**, pp3986
- [Legrand93] : P. Legrand, (1993), Etude de l'endommagement de cibles métalliques par des ions de forte énergie: le cas du fer, résultats expérimentaux et simulations numériques, thèse de doctorat, *Université Paris VII*.
- [Lennard-Jones24] : J.E. Lennard-Jones, (1924), on the Determination of Molecular Fields , *Proceedings of the Royal Society of London A*, **106**, pp.463.
- [Lida88] T. Iida and R.I.L. Guthrie, (1988), The Physical Properties of Liquid Metals. In: , Clarendon Press, Oxford , p. 288.
- [Lucas72] : L. Lucas, (1972), Densité des métaux à haute température (dans les états solide et liquide) deuxième partie , *mémoires scientifiques revue metallurgique*, **69**, pp763 .
- [Morse29] : P. Morse, (1929), Diatomic molecules according to the wave mechanics. Vibrational levels. , *Physical review*, **34**, pp.57.
- [Nosé84] S. Nosé, (1984), A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods, *Journal of Chemical Physics*, **81**, p511
- [Rappaz99] : M. Rappaz, J. Drezet, M. Gremaud, (1999), A new hot-tearing criterion, *Metallurgical and Material Transactions A*, **30A**, pp.449.

- [Rosato89] : V. Rosato, (1989), Comparative behavior of carbon in b.c.c. and f.c.c. iron, *Acta metallurgica*, **37**, pp.2759.
- [Rosato86] : V. Rosato, (1986), Etude de la structure atomique et des propriétés thermodynamiques des surfaces aux températures élevées par dynamique moléculaire, thèse de doctorat, *Université de Nancy 1*.
- [Rosato89 a] : V. Rosato, M. Guillopé, B. Legrand, (1989), Thermodynamical and structural properties of f.c.c. transition metals using a simple tight-binding model, *philosophical magazine A*, **59**, pp.321.
- [Saito69] : T. Saito, Y. Shiraishi, Y. Sakuma, (1969), Density measurement of molten metals by levitation technique at temperatures between 1800°C and 2200°C, *Transactions ISIJ*, **9**, pp.118.
- [Shu99] D.J. Shu, D.Y. Sun, X. G. Gong, (1999) A molecular-dynamics study of the anisotropic surface-melting properties of Al(110) *Surface Sciences*, **441**, pp206
- [Stillinger85] : F.H. Stillinger, T.A. Weber, (1985), Computer simulation of local order in condensed phases of silicon, *Physical Review B*, **62**, pp.6239.
- [Sun07] : J. Sun, S. Simon, (2007), the melting behavior of aluminum nanoparticles, *thermochimica Acta*, **463**, pp.32.
- [Sutton90] : A. Sutton, J. Chen, (1990), Long-range Finnis-Sinclair potentials, *Philosophical Magazine Letters*, **61**, pp.139.
- [Tersoff88] : J. Tersoff, (1988), Empirical interatomic potential for

silicon with improved elastic properties , *physical review B*, **38**, pp.9902.

[VanderVeen99] : J.F. Van der Veen, (1999), melting and freezing at surface , *Surface science*, **433**, pp.1.

[Verlet67] : L. Verlet, (1967), computer "experiments" on classical fluids. Thermodynamical properties of Lennard Jones molecules , *physical review*, **159**, pp.98.

[Wallace60] : D.C. Wallace, P.H. Sidles, G. Danielson, (1960), Specific heat of high purity Iron by pulse heating method , *Journal of applied physics*, **31**, pp168.

[Watanabe81] : S. Watanabe, Y. Tsu, K. Takano, Y. Shiraishi, (1981), Density of pure Iron in solid and liquid states , *The Japan Institute of Metals*, **45**, pp.242.

Chapitre 7 : Conclusions et discussion

Comme nous l'avons vu tout au long de ce manuscrit, l'analyse de la fissuration à chaud des aciers est complexe, car elle nécessite de comprendre de multiples phénomènes, le plus souvent couplés, mais aussi de connaître des grandeurs physiques difficilement accessibles.

Comme nous avons pu le montrer une approche basée sur des critères de fissuration empirique est insuffisante. En effet, la prédiction du risque de fissure est très étroitement liée aux paramètres utilisés pour les simulations, au premier rang desquels les paramètres rhéologiques. Mais pour être pertinente cette rhéologie doit être connue dans un domaine de températures, de déformations et de vitesses de déformation le plus proche possible des conditions de fonderie.

D'autre part si la rhéologie s'avère être absolument nécessaire pour une meilleure prédiction à l'échelle macroscopique, les phénomènes provoquant la fissuration sont eux mésoscopiques et même plutôt microscopiques c'est-à-dire inter ou intra granulaires. La fissuration se produisant dans un domaine interdendritique, le problème d'échelle est très important, et les échelles sont très faibles. Ceci est vrai pour la fissuration à chaud, mais c'est aussi vrai pour l'ensemble des problèmes de croissance de grain ou de dendrites.

Cette thèse se veut une contribution à ces deux problématiques, d'une part la caractérisation rhéologique à chaud et d'autre part la compréhension micro de la fissuration.

Concernant la caractérisation rhéologique, les moyens de caractérisations existent aujourd'hui, qu'ils soient commerciaux (Gleeble) ou développés au sein du laboratoire (Taboo), mais restent complexes dans leur analyse. En effet le caractère résistif du chauffage induit des gradients thermiques, qui faute de pouvoir être maîtrisés, doivent pouvoir être compris, connus et pris en compte aussi bien dans l'analyse des essais, que pendant leur réalisation même. Cela passe par la simulation numérique et par l'instrumentation complète de la machine d'essais.

Cette simulation, qui a été validée sur des cas numériques et à l'aide de mesures expérimentales, nous a dans un premier temps permis de comprendre la distribution

spatiale de températures et ainsi de concevoir une géométrie optimisée. Elle s'est ensuite avérée particulièrement utile pour l'analyse des essais Taboo et Gleeble.

Parallèlement, les développements que nous avons menés pour la mesure des déplacements par méthode de speckles laser permettent de proposer sur la base de la littérature existante, un nouvel algorithme innovant et performant pour mesurer des champs de déplacement. Cet algorithme (CC-CS) couple une méthode classique d'inter-corrélation avec une méthode interspectre. Le principe de la mesure a été décliné en deux méthodes. L'une est orientée mesure de champ, c'est celle que nous utilisons pour les essais Taboo. L'autre est orientée « extensométrie virtuelle », applicable aux essais Taboo, mais surtout développée pour les éprouvettes cylindriques de type Gleeble. De ce point de vue, nous avons eu l'opportunité de mettre en place et d'animer un « transfert de technologie » très rapide entre le Cemef et les équipes Ascometal-Creas. Nous avons aussi apporté des solutions à la problématique des hautes températures, de par la méthode elle-même (mesure sans contact) mais aussi en résolvant les problèmes d'oxydation. L'utilisation d'un gaz inerte type argon-hydrogène a été rendue possible lors de ces essais parce que la durée des essais était relativement courte.

La modélisation et l'instrumentation des essais ont été exploitées dans le but d'identifier le comportement de deux nuances d'acier. Pour cela nous avons utilisé un module d'analyse inverse, alimenté par nos mesures d'effort effectuées sur des essais de traction complexes, non monotones. Ceci nous a permis de réaliser une caractérisation complète de deux nuances d'acier, un acier à ultra-haute résistance (DP780) et un acier micro-allié (ST52). Cette identification s'est faite sur la base de mesure de forces mais aussi sur une mesure de l'allongement par speckles laser.

L'étude à l'échelle sub-micronique grâce à la dynamique moléculaire a représenté une thématique nouvelle au Cemef, et peut représenter d'une part une partie amont indispensable pour les simulations d'interactions solide liquide à l'échelle d'un VER, telles que celles effectuées par ailleurs dans le cadre du projet cracracks ou celles qu'on voit apparaître de plus en plus dans la littérature. Et d'autre part, cette partie de notre travail nous a permis d'expliquer certains phénomènes et certaines évolutions non observables, et d'apporter une vision différente sur les problèmes de fissuration. Au vu des résultats, il semble que la cavitation soit un phénomène majeur pouvant intervenir lors de la mise sous contrainte de zones liquides. Mais elle nécessite l'existence de très fortes dépressions pour être amorcée. Ainsi le phénomène de cavitation s'accompagnerait d'une refusion importante du front dendritique environnant. Aux faibles fractions solides, on conçoit que cette refusion agisse favorablement sur l'alimentation en liquide évitant ainsi l'amorçage de fissures. En revanche, en fond de zone pâteuse, aux fractions solides les plus élevées, cette refusion bien que sensible, devrait être insuffisante pour permettre une telle alimentation et empêcher la crique à chaud. Nous avons pu aussi constater que les pressions de cavitation déterminées par dynamique moléculaire étaient très élevées ce qui est probablement dû à l'absence d'hétérogénéité dans nos systèmes. Enfin, dans une dernière partie, nous avons présenté des premiers résultats de comportement mécanique en élasticité. Ces résultats donnent des évolutions correctes de différentes propriétés mais ils pourraient être

complétés pour obtenir la totalité de la matrice d'élasticité. Le passage à la plasticité peut par contre s'avérer plus difficile.

Si je devais qualifier le travail effectué durant cette thèse, j'utiliserais une métaphore d'un « bâtiment », nous avons souvent défriché le terrain, qu'il s'agisse des speckles ou de la dynamique moléculaire sur les métaux, puisque ceci est totalement nouveau au Cemef. Ainsi, nous avons pu creuser les fondations et bâtir un édifice au-dessus de ces fondations. Restent les aménagements intérieurs ; en effet le projet Cracks est entré dans sa dernière année, les synergies et les résultats commencent à cristalliser alors que ma thèse se termine. Mais je pense que nous avons pu mettre en place des outils nouveaux et même novateurs. Peu de systèmes aujourd'hui sont en effet aujourd'hui capables de mesurer des déformations à hautes températures.

Ces outils nouveaux nous permettent de penser à de nouvelles applications et aussi d'imaginer des améliorations possibles notamment en ce qui concerne les techniques de mesure sans contact.

Taboo représente une machine de simulation thermomécanique permettant de concevoir des applications multiples, au premier rang desquelles naturellement toutes les applications liées à la solidification, et notamment les procédés de soudage. Il est évident que lors de tels procédés une bonne connaissance de la rhéologie et notamment à très haute température est nécessaire lors de la simulation des distorsions ou bien des problèmes de criques à chaud.

Les applications très hautes températures ne représentent pas le seul champ d'application de Taboo, toutes les caractérisations mécaniques sur des aciers en température, pour des applications aux traitements thermiques de certaines pièces industrielles, ou bien encore les suivis de changement de phase par mesure de résistivité peuvent représenter soit des axes d'étude soit des axes de développement. Dans ce contexte une version plus élaborée de Taboo permettant notamment la réalisation de vrais essais cycliques (traction compression) ou des essais de type Satoh-test représenterait un vrai plus pour le savoir faire haute température du laboratoire.

Mais dans le cadre d'une caractérisation rhéologique à chaud des aciers, les développements effectués dans la thèse en terme de mesure de champs sont un axe d'étude très porteur. En effet hormis l'utilisation à haute température qui représente déjà un premier avantage, l'utilisation de speckles peut aussi se révéler très utile pour des mesures en grandes déformations, mesure durant laquelle un mouchetis classique va s'écailler et l'information va être perdue dans la zone « la plus importante ». En effet, dans le cas de l'utilisation d'un laser, à tout instant une lumière est projetée sur la totalité de la zone de mesure, y compris dans la zone de grande déformation ; ainsi du moment où, entre deux prises de vue, la déformation n'est pas trop grande, une mesure pourra être effectuée sur toute l'éprouvette. On considère souvent que les mesures par speckles laser ne sont pas utilisables en grandes déformations ; ceci est seulement vrai si une déformation trop importante est appliquée entre deux prises de vue. Dans tous les autres cas, on peut considérer qu'un grand déplacement n'est qu'une somme de petits déplacements. Dès lors,

le champ d'application des mesures speckles devient très large et même bien au-delà de la caractérisation des aciers.

Cette étude des grands déplacements nécessite néanmoins une description lagrangienne du déplacement plutôt qu'une description eulérienne tel que nous l'avons décrit ici. Parmi les autres évolutions envisageables, je retiendrais aussi le passage aux champs de déformation. En effet, en mécanique la déformation représente une grandeur particulièrement utilisée. Mais comme cette grandeur est donnée par une dérivée du champ de déplacement, elle s'avère être très sensible au bruit de mesure, de ce fait le filtrage des signaux et des mesures expérimentales est important.

De plus, au vu des performances de l'algorithme l'analyse en direct et le pilotage des essais via une mesure speckles devrait être facilement réalisable. Ce dernier point permettrait de réaliser des essais à vitesse de déformation constante. Parmi ces perspectives certaines sont d'ailleurs en cours de développement, notamment en ce qui concerne le passage d'une description eulérienne à une description lagrangienne du déplacement, mais aussi le passage au champ de déformation ainsi que les différents types de filtrages pouvant être utilisés sur des champs de déplacement. Comme le montre la Figure 179, ces premiers développements ont pu être utilisés pour étudier lors d'un essai de traction à 850°C, le champ de déplacement et le champ de contraintes sur une éprouvette percée de deux trous. Le but étant à terme, au vu de la précision espérée avec une mesure de type speckles, de pouvoir étudier la présence ou non d'inclusions ou de porosité ainsi que de voir leurs effets sur le comportement de la matrice.

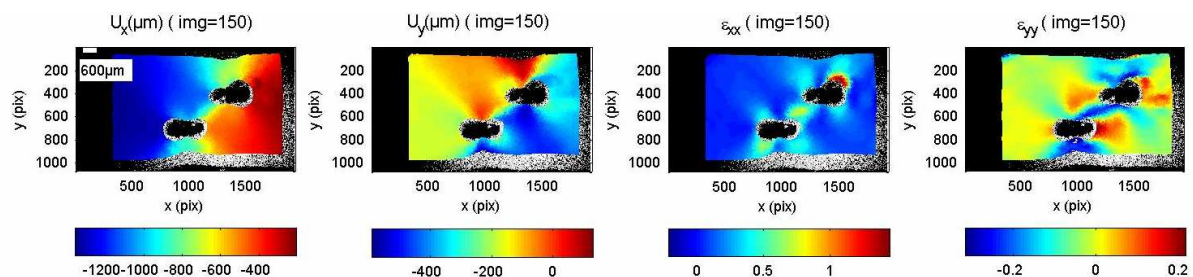


Figure 179 : Champ de déplacement et de déformation sur une éprouvette percée lors d'un essai de traction à 850°C

En ce qui concerne la technique mise au point chez Ascometal, même si des problèmes sont encore rencontrés avec cette technique, il semblerait qu'ils soient principalement causés par la machine Gleeble elle-même. Donc, sorti du contexte, cet extensomètre speckles pourrait être appliqué à des mesures rhéologiques sur des éprouvettes cylindriques dont le diamètre pourrait être très faible.

En ce qui concerne l'analyse inverse, comme nous l'avons vu une optimisation basée sur un champ de déplacement représenterait un vrai plus. Un premier pas a déjà été réalisé dans ce sens en collaboration avec la thèse d'Emile Roux. D'autre part l'utilisation de lois de comportement plus complexes pourrait s'avérer utile.

Enfin en ce qui concerne la dynamique moléculaire, une des prochaines évolutions pourrait être l'ajout d'éléments autres que le fer. Des éléments ont déjà été publiés dans la littérature sur ce sujet, notamment avec l'ajout de carbone, ou encore sur des interactions Fe-N. Le principal problème pour les interactions multi corps consiste à trouver des potentiels réalistes pour définir les interactions couplées. Sachant que le nombre de potentiels augmente comme le factoriel du nombre d'éléments d'alliage.

En dehors des simples développements qu'il s'agisse de la technique speckles/Taboo ou de la dynamique moléculaires, le changement d'échelles et la création de ponts entre ces différentes échelles paraît particulièrement attrayant. Et notamment le retour sur une échelle mésoscopique.

- Le premier pont pouvant être construit, peut être le plus intuitif, est celui reliant l'échelle micro à l'échelle méso. En effet, bien au-delà de la seule problématique de la fissuration à chaud, la dynamique moléculaire peut apporter des grandeurs physiques locales difficilement mesurables.

Si l'on s'intéresse à des écoulements de fluides dans un squelette solide, les notions de tension de surface, ou de viscosité sont totalement incontournables.

Si maintenant on souhaite étudier la cavitation, l'évaluation par le calcul de pressions de cavitation serait une contribution importante.

Il est vrai que pour ces cas la présence de quelques éléments d'alliage tels que le soufre et le phosphore sont importants. En effet comme l'avait montré Olivier Cerri dans sa thèse, en proposant un critère de fissuration basé sur le critère de Won & Oh mais prenant en compte la présence de certains éléments d'alliage, ceux-ci jouent un rôle direct et premier dans l'apparition de criques à chaud. En expliquent et en quantifiant l'influence de ces éléments sur certains paramètres clés (tension de surface, pression de cavitation, viscosité), la dynamique moléculaire pourrait rendre ces critères moins phénoménologiques (moins semi-empirique).

Enfin le dernier apport de la dynamique moléculaire semble bien être mécanique. En effet, connaissant le tenseur d'élasticité pour différentes orientations cristallines, ils pourrait être intéressant de simuler numériquement un VER comportant structures dendritique et/ou des des grains d'orientations cristallines différentes afin de voir s'il est possible de remonter à des grandeurs mécaniques telles qu'on peut les observer et analyser à l'échelle macro.

- Le dernier pont à construire est donc entre les échelles macro et le méso, et là encore finalement le lien est direct. Les essais rhéologiques peuvent fournir des conditions aux limites de VER numériques pour un ensemble de simulations mésoscopiques.

Annexe : Propriétés thermophysiques des différentes nuances d'acier

1. Propriétés des nuances d'acier DP780 et ST52

1.1 Densité

Les valeurs de densité en fonction de la température pour les nuances d'acier ont été déterminées des coefficients de dilations mesurées par dilatométrie et à partir des mesures de densité à température par pycnométrie. Les densités au liquidus ont été déterminées en utilisant un coefficient de retrait 3.56%. Quant aux densités à l'état liquides elles ont été déterminées en utilisant le coefficient de volume spécifique du fer liquide. Les courbes présentent les évolutions de densité en fonction de la température.

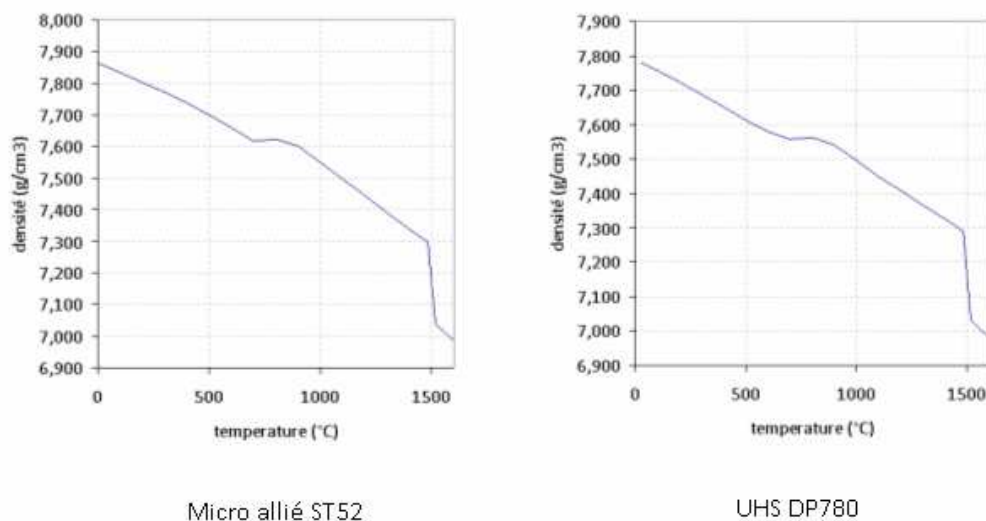
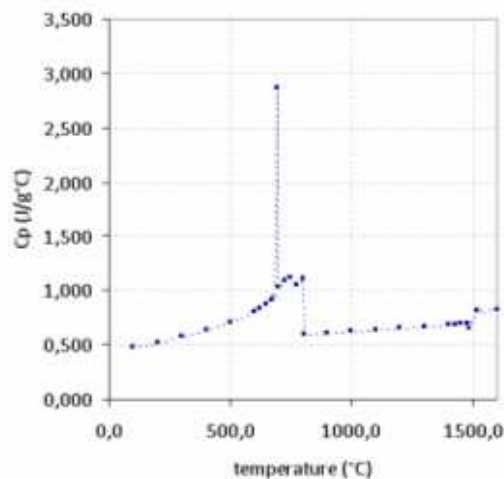


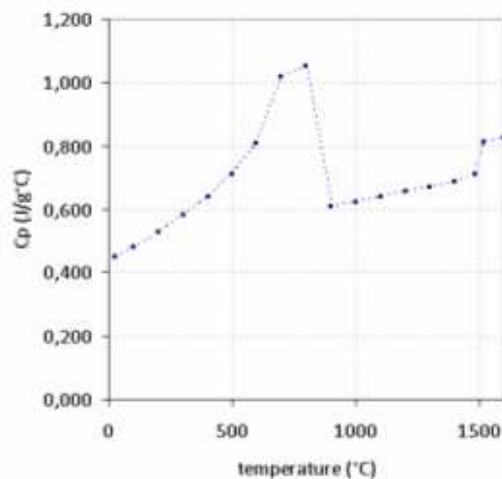
Figure 1: évolutions de la densité en fonction de la température

1.2 Chaleur spécifique et enthalpie

Les valeurs de chaleur spécifique et d'enthalpie ont été déterminées en fonction de la température en utilisant « thermocalc ». Les courbes, ci-dessous présentent les valeurs obtenues pour la chaleur spécifique et l'enthalpie.

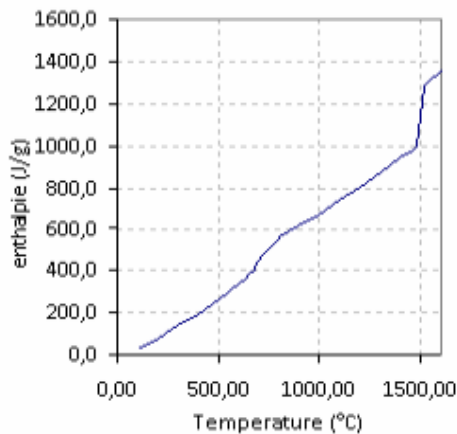


Micro allié ST52

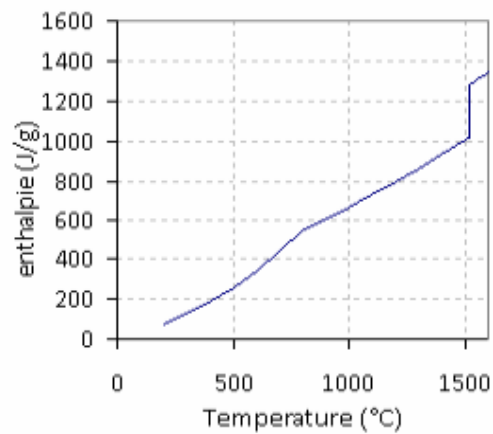


UHS DP780

Figure 2: évolutions de la chaleur spécifique en fonction de la température



Micro allié ST52



UHS DP780

Figure 3: évolutions de l'enthalpie en fonction de la température

1.3 Conductivité thermique

Les valeurs de conductivités thermiques du DP780 à l'état solide ont été calculées à partir des valeurs de densité, de chaleur spécifique et de diffusivité. Cette dernière étant

mesurée par une méthode laser-Flash). La conductivité thermique découle de la formule suivante :

$$\lambda(T) = C_p(T) \times \rho(T) \times \alpha(T)$$

En ce qui concerne les autres nuances, les valeurs sont issues d'essais expérimentaux. Concernant la conductivité à l'état liquide elle est considérée égale à la conductivité du fer pur liquide

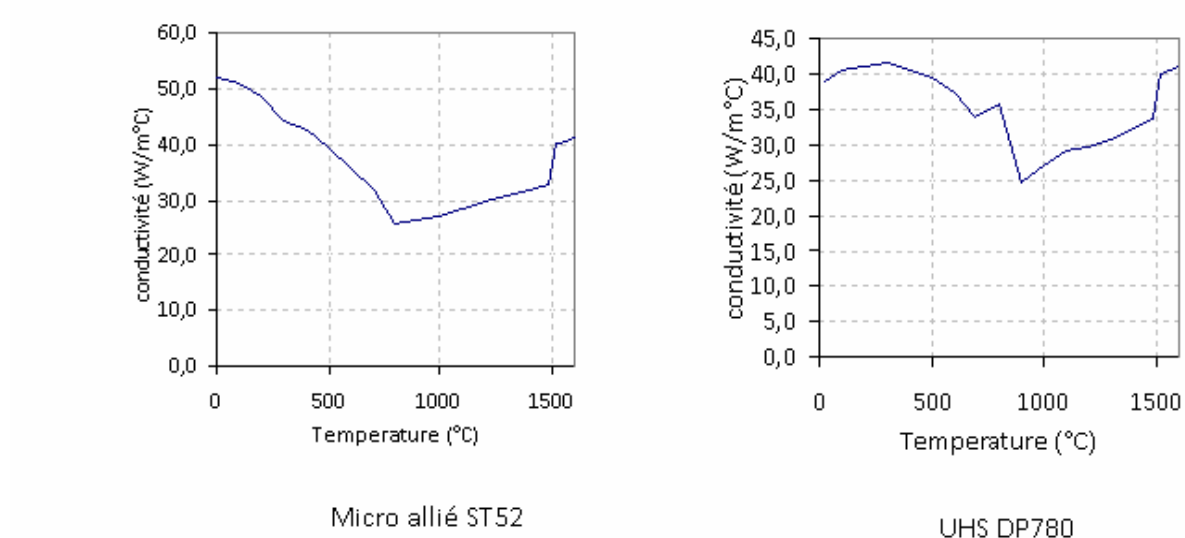


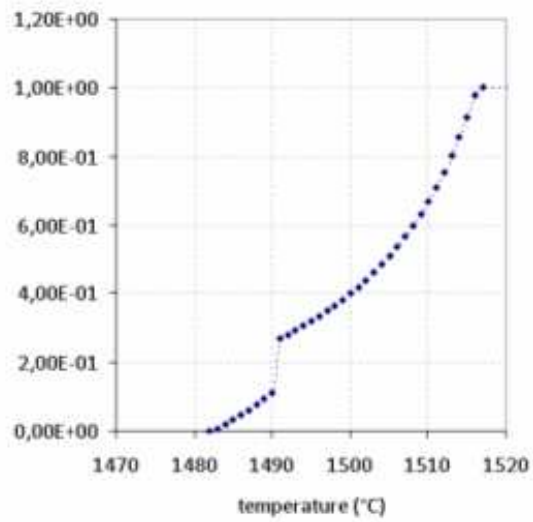
Figure 4: évolutions de la conductivité thermique en fonction de la température

1.4 Fraction liquide

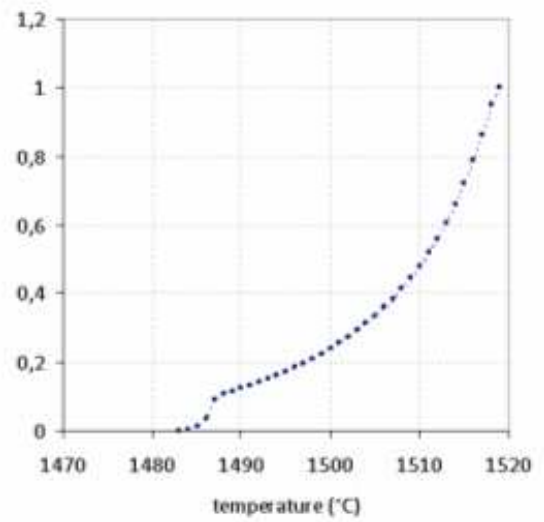
La variation de fraction liquide pour les différentes nuances a été calculée à l'aide du modèle thermodynamique « CEQCSI » développé par ArcelorMittal Research. Les températures de liquidus et solidus sont données dans le tableau ci-dessous. Les courbes présentent l'évolution de la fraction liquide.

	ST52	DP780
Tliquidus	1517	1519
Tsolidus	1482	1483

Figure 5: températures de liquidus et solidus



Micro allié ST52

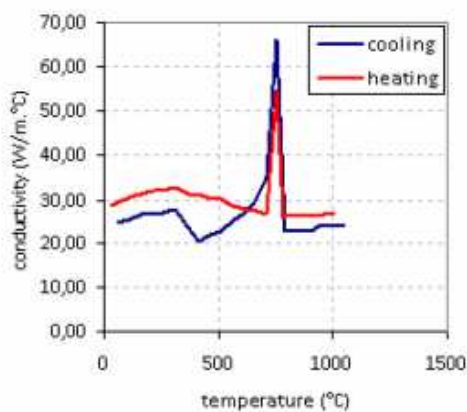


UHS DP780

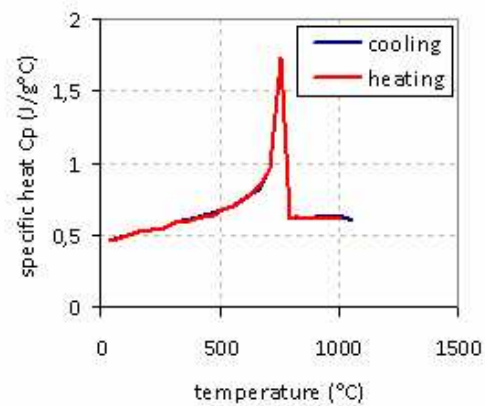
Figure 6: évolutions de la fraction liquide en fonction de la température

2. Propriétés thermophysiques de la nuance d'acier 40CMD8

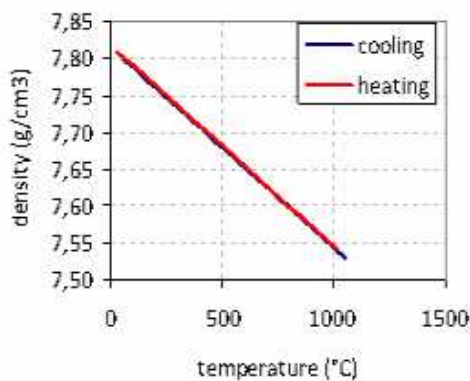
Les données thermophysiques pour le 40CMD8 résultent de mesures réalisées par ArcelorMittal le Creusot en collaboration avec le CRITT. Le chemin de solidification a quant à lui été calculé avec Thermocalc.



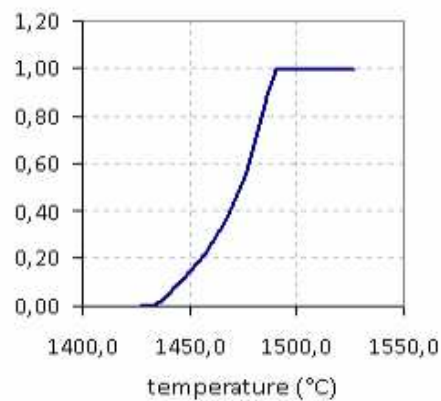
Conductivité thermique



Chaleur spécifique



densité

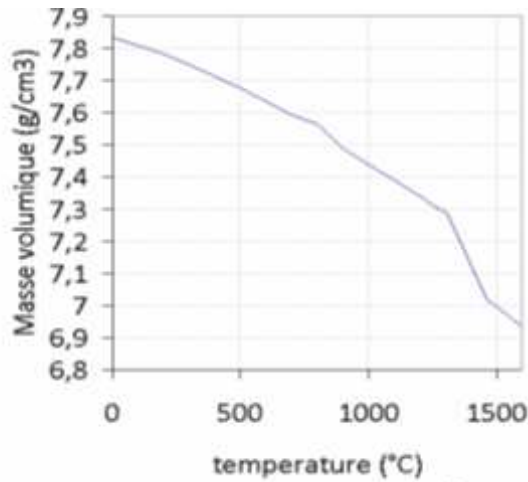


fraction liquide

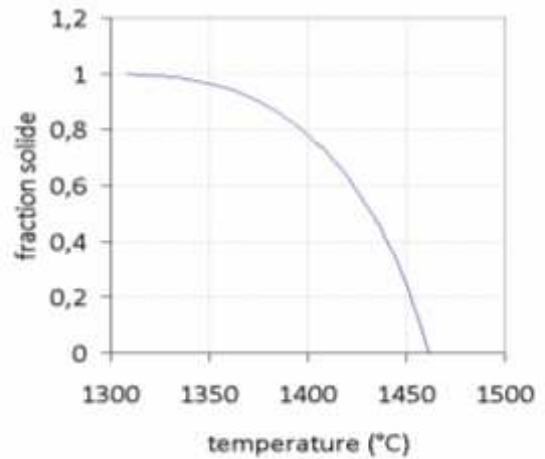
Figure 7: résumé des données thermophysiques du 40CMD8

3. Propriétés thermophysiques de la nuance d'acier 100Cr6

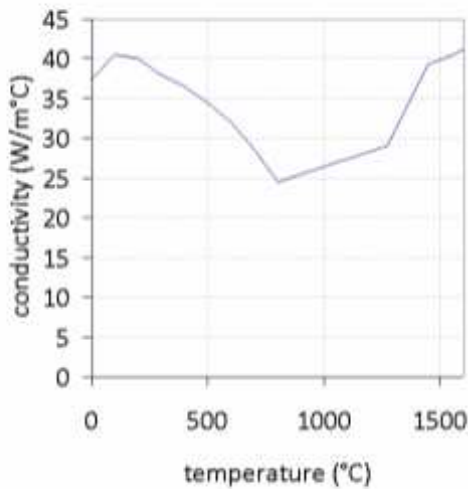
Les données thermophysiques pour le 100Cr6 ont été fournies par Ascometal-Creas. Ces données sont issues d'un rapport interne Irsid [Bobadilla93]



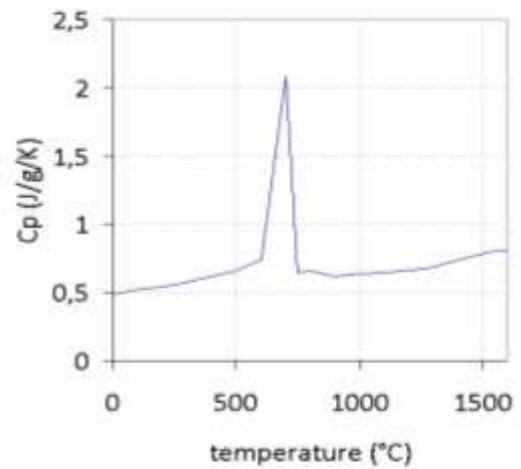
densité



fraction liquide



Conductivité thermique



Chaleur spécifique

Figure 8: résumé des données thermophysiques du 100Cr6

Référence

[Bobadilla93] M. Bobadilla, M. Niederlaender, C. Nuss, G. Perrin, et J. Sélaries, (1993) Données thermophysiques utilisées dans les modèles thermiques de solidification en coulée continue, pour différentes nuances d'aciers. *Rapport Interne*, IRSID

Vers une meilleure compréhension et caractérisation du comportement des aciers à très haute température

RESUME : La compréhension du phénomène de fissuration à chaud lors de la solidification des aciers représente un challenge tant scientifique qu'industriel car les mécanismes sont peu connus. Cela provient principalement d'une méconnaissance des propriétés mécaniques dans des conditions similaires à celles rencontrées durant la solidification. Des essais thermo-mécaniques ont été réalisés sur une machine de traction avec chauffage par effet Joule (Taboo). Taboo permet de réaliser des chargements mécaniques pour de faibles vitesses de déformation et des températures comprises entre 900°C et la température de solidus. Une des conséquences du chauffage résistif est l'existence d'un fort gradient thermique longitudinal dans la zone centrale de l'éprouvette, avec pour conséquence une déformation hétérogène. L'existence de ces hétérogénéités nous ont conduit à utiliser une technique de mesure de champ afin de connaître précisément le champ de déplacement dans l'éprouvette. Les techniques classiquement utilisées n'étant pas applicables au contexte très haute température, nous avons développé une mesure de champ basée sur une technique de granulométrie de speckles laser. En parallèle, nous avons développé un algorithme d'analyse original couplant une méthode d'intercorrélation et une méthode interspectre. De plus pour analyser et dimensionner les échantillons utilisés lors des essais mécaniques, nous avons développé et exploité un code élément finis multiphysique, sur la base du logiciel Forge, capable de simuler l'essai Taboo dans sa globalité. Les résultats des essais mécaniques et des simulations ont ainsi pu être intégrés dans une boucle d'optimisation afin d'identifier les paramètres d'une loi de comportement élasto-viscoplastique pour deux nuances d'acier. Enfin, dans un dernier volet de ce travail de thèse, une technique de dynamique moléculaire a été utilisée d'une part pour déterminer certaines autres propriétés thermophysiques du fer telles que la viscosité, les paramètres élastiques, le coefficient de dilatation, et d'autre part pour modéliser aux petites échelles la cavitation dans le liquide interdendritique, à l'origine de la fissuration à chaud.

Mots clés : fissuration à chaud, mesure de champs, élément finis multiphysique, analyse inverse, dynamique moléculaire

ABSTRACT : The understanding of solidification crack phenomena in steels is a scientific and industrial challenge, because the physical mechanisms of hot tearing are far from being understood. One of challenges is the rheological characterization, which is particularly difficult at very high temperature, low strain and low strain rate. Rheological tests have been carried out using a direct resistance heating machine (Taboo). The Taboo set up allows stepwise loading at very low strain rate and temperature between 900°C and the solidus temperature. A specificity of resistance heating is a high thermal heterogeneity along the sample, producing a heterogeneous deformation. An accurate analysis of the test requires then the measurement of the displacement field, but this cannot be achieved at a very high temperature using classical techniques. This has brought us to develop a new method based on laser speckles granulometry. An innovative technique coupling cross-correlation and cross-spectrum methods has been developed to calculate the displacement field. Moreover, a finite element multiphysics model, based on Forge software, has been developed to simulate the entire experimental process, and consequently to optimize the sample geometry. Experimental and simulated results have been integrated in an optimisation loop to identify the constitutive elastic-viscoplastic parameters of two steel grades. Finally a molecular dynamics approach has been used, first to determine material properties of iron such as viscosity, elastic parameters and dilatation coefficients, and second to provide a small scale numerical modelling of cavitation in interdendritic films which is the source of solidification cracking.

Keywords : hot tearing, full field measurement, finite element multiphysics model, inverse analysis, molecular dynamics

